Piotr Pokarowski

Lasy skierowane i algorytmy związane z łańcuchami Markowa

Praca doktorska napisana pod kierunkiem
doc. dra hab. Lesława Gajka

Instytut Matematyczny
Polskiej Akademii Nauk

Warszawa 1997

Spis treści

1. Wstęp 3
2. Lasy skierowane i łańcuchy Markowa 12
   2.1. Podstawowe definicje i stwierdzenia 12
   2.2. Rozwinięcia w lasy skierowane dla dopełnień algebraicznych laplasjanu 18
   2.3. Rozwinięcia w lasy skierowane dla rozkładu stacjonarnego i macierzy granicznej łańcucha Markowa 23
   2.4. Rozwinięcia w lasy skierowane dla innych charakterystyk łańcuchów Markowa . 31
   2.5. Rozwinięcia w lasy skierowane a wartości własne laplasjanu Markowa 35
3. Algorytmy dla układów równań liniowych związanych z łańcuchami Markowa 40
   3.1. Względnie zaburzone łańcuchy Markowa 40
   3.2. Algorytmy 55
   3.3. Analiza algorytmów 60
4. Algorytmy dla potęgowo zaburzonych łańcuchów Markowa 64
   4.1. Potęgowo zaburzone łańcuchy Markowa 64
   4.2. Algorytmy 72
   4.3. Analiza algorytmów 85
5. Algorytmy Monte Carlo generujące łańcuchy Markowa dla całkowania 99
   5.1. Oszacowania błędu estymacji całki względem rozkładu stacjonarnego dla odwracalnych łańcuchów Markowa 99
   5.2. Oszacowania błędu estymacji całki dla Θ-potęgowo zaburzonych, odwracalnych łańcuchów Markowa 103
   5.3. Oszacowania błędu dla algorytmów Metropolisa–Hastingsa oraz próbnika Gibbsa 106
6. Algorytmy Monte Carlo generujące łańcuchy Markowa dla poszukiwania minimum globalnego 112
   6.1. Niejednorodne łańcuchy Markowa. Podstawowe definicje i stwierdzenia 112
   6.2. Klasy powracające niejednorodnych łańcuchów Markowa z potęgowo znikającymi przejściami 115
   6.3. Osiągalność globalnego minimum z prawdopodobieństwem 1 przez Simulated Annealing 128

   Literatura 134

   Dodatek 140

1. Wstęp.

1.1. Praca jest poświęcona problemom obliczeniowym związanym z łańcuchami Markowa ($\mathcal{LM}$) o skończonej przestrzeni stanów. W rozdziale 2., za pomocą pewnych kombinatorycznych struktur — lasów skierowanych, przedstawiam wzory i oszacowania dla takich charakterystyk $\mathcal{LM}$, jak rozkład stacjonarny, macierz graniczna, średni czas dojścia do zbioru stanów R, czy wartości własne macierzy przejścia (generatora). Wzory te i oszacowania mają postać funkcji wymiernych, których argumentami są elementy macierzy przejścia lub generatora. Wykorzystuję je do analizy poprawności, kosztu czasowego i dokładności czterech grup algorytmów:

(1) algorytmów numerycznych dla charakterystyk $\mathcal{LM}$, które są rozwiązaniami układów równań liniowych (rozdział 3.);
(2) algorytmów numeryczno–kombinatorycznych dla pierwszego wyrazu rozwinięcia charakterystyk $\mathcal{LM}$ zaburzonych potęgowo (rozdział 4.);
(3) algorytmów Monte Carlo generujących $\mathcal{LM}$ dla całkowania funkcji na zbiorze skończonym, takich jak np. algorytm Metropolisa czy próbnik Gibbsa (rozdział 5.);
(4) algorytmów Monte Carlo generujących niejednorodne $\mathcal{LM}$ dla poszukiwania minimum funkcji na zbiorze skończonym, takich jak np. algorytm Simulated Annealing (rozdział 6.).

Związki łańcuchów Markowa i problemów obliczeniowych rozważanych w tej pracy są dwóch rodzajów:

— albo punktem wyjścia jest model matematyczny opisany przez $\mathcal{LM}$ o zadanej macierzy przejścia czy generatorze (tak jest w rozdziałach 3. i 4.), natomiast celem jest obliczenie pewnej charakterystyki tego modelu
— albo przeciwnie, punktem wyjścia jest pewien problem obliczeniowy (w rozdziale 5. — całkowanie, w rozdziale 6. — optymalizacja), natomiast celem jest analiza algorytmów rozwiązujących ten problem, modelowanych za pomocą $\mathcal{LM}$.

1.2. Dla bardziej precyzyjnego opisu treści pracy konieczne będą następujące definicje.

Niech S będzie ustalonym, niepustym zbiorem skończonym oraz $E \subseteq S \times S$. Załóżmy dla wygody, że $S = \{1, 2, \ldots, s\}$. Parę $g := (S, E)$ nazywać będziemy *grafem skierowanym o zbiorze wierzchołków (stanów)* S i zbiorze *krawędzi* E.

Podgrafem g_1 grafu g nazywać będziemy parę (S_1, E_1) taką, że $S_1 \subseteq S$ oraz $E_1 \subseteq E \cap (S_1 \times S_1)$. Jeśli $S_1 = S$ to podgraf g_1 grafu g nazywać będziemy *rozpinającym*.

Będziemy mówić, że istnieje *droga* ze stanu i do j, jeżeli $i = j$ lub istnieje liczba $n \geq 2$ oraz ciąg stanów $i = i_1, i_2, \ldots, i_n = j$ taki, że $i_k \in S$ oraz $(i_k, i_{k+1}) \in E$ dla $k = 1, \ldots, n-1$. *Cyklem* nazywać będziemy drogę z danego stanu do tego samego stanu.

Lasem skierowanym rozpinającym w g, lub po prostu *lasem*, nazywać będziemy podgraf skierowany bez cykli $f := (S, E_f)$ grafu g, w którym z każdego wierzchołka wychodzi co najwyżej jedna krawędź. Zbiór wierzchołków $R \subseteq S$, z których nie wychodzi żadna krawędź lasu f nazywać będziemy *korzeniem* f. Rysunek 1.1.1 w Dodatku przedstawia pewien graf skierowany g. Stany są reprezentowane jako kółka, natomiast krawędzie jako strzałki. Rysunek 1.1.2 przedstawia las skierowany o korzeniu R w grafie g.

Niech $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j \in S}$ będzie macierzą kwadratową wymiaru $s \times s$ ($s \geq 2$) nad ciałem liczb zespolonych $\mathbb{C}$. *Grafem skierowanym ważonym, indukowanym* przez $\mathbf{A}$, nazywać będziemy macierz $\mathbf{A}$ wraz z grafem $g(\mathbf{A}) := (S, E)$, gdzie $E = \{(i, j) \in S \times S : \ a_{ij} \neq 0\}$. *Wagą multiplikatywną* lasu $f = (S, E_f)$, w grafie $g(\mathbf{A})$, nazywać będziemy liczbę

$$w(f) := \prod_{(i,j) \in E_f} (-a_{ij}) \quad (\text{przyjmiemy } w((S, \emptyset)) := 1).$$

Wagą zbioru lasów F, w grafie $g(\mathbf{A})$, nazywać będziemy liczbę

$$w(F) := \sum_{f \in F} w(f) \quad (\text{przyjmiemy } w(\emptyset) := 0).$$

Laplasjanem nazywać będziemy dowolną macierz $\mathbf{L} := (l_{ij})_{i,j=1}^{s}$ nad ciałem $\mathbb{C}$ taką, że $l_{ii} = -\sum_{j:\, j \neq i} l_{ij}$ dla $i = 1, \ldots, s$. Dla ustalonego $R \subseteq S$, $\mathbf{L}(R|R)$ oznaczać będzie macierz powstałą z $\mathbf{L}$ przez usunięcie wierszy i kolumn o indeksach należących do R.

Niech dana będzie przestrzeń probabilistyczna $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{Pr})$ oraz łańcuch Markowa (*LM*) $X = (X_t)_{t \in T}$ określony na $(\Omega, \mathcal{F})$ o przestrzeni stanów S. W przypadku czasu dyskretnego ($T \subseteq \mathbb{N}$), łańcuchy Markowa wprowadza się najczęściej za pomocą

macierzy przejścia $\mathbf{P} = (p_{ij})_{i,j\in S}$, natomiast w przypadku czasu ciągłego ($T \subseteq \mathbb{R}^+$) — za pomocą generatora $\mathbf{Q} = (q_{ij})_{i,j\in S}$. Niech $\mathbf{I}_s$ oznacza macierz jednostkową rzędu $s \times s$. Łatwo zauważyć, że macierze $\mathbf{L}(\mathbf{P}) = \mathbf{I}_s - \mathbf{P}$ oraz $\mathbf{L}(\mathbf{Q}) = -\mathbf{Q}$ są laplasjanami. Wiele z podanych dalej faktów nie zależy od tego, czy czas jest ciągły czy dyskretny, dlatego też dla jednolitości rozważań łańcuch Markowa będziemy wprowadzać za pomocą *laplasjanu Markowa*, tzn. laplasjanu, którego elementy niediagonalne są rzeczywiste i niedodatnie.

1.3. W rozdziale 2., w lematach 2.2 i 2.3 podaję następujące rozwinięcia w lasy skierowane dla wyznacznika oraz dla wyrazów macierzy odwrotnej do macierzy $\mathbf{L}(R\big|R)$:

$$\det \mathbf{L}(R\big|R) = w(F(R)) \quad \text{oraz}$$
$$\mathbf{L}(R\big|R)^{-1} = \left[\frac{w(F_{ij}(R,j))}{w(F(R))}\right]_{i,j\in S},$$

gdzie $F(R)$ jest zbiorem lasów w grafie $g(\mathbf{L})$ o korzeniu R oraz $F_{ij}(R,j)$ — zbiorem lasów w grafie $g(\mathbf{L})$ o korzeniu $R\cup\{j\}$, w których istnieje droga ze stanu i do stanu j. W dowodzie wykorzystuję ogólną wersję tzw. "Matrix–tree theorem" ([Cha], [Che, problem 4.16]).

Za pomocą lematu 2.2 dowodzę znane twierdzenia przedstawiające charakterystyki *ŁM* jako rozwiązania układów równań liniowych (twierdzenie 2.1 (1), twierdzenie 2.1 (2) (b) i (c), twierdzenie 2.2, twierdzenie 2.5, wniosek 2.4). Podane dowody są inne od dowodów znanych w literaturze, ponieważ nie korzystałem w nich z argumentów analitycznych (twierdzenie Perrona–Frobeniusa, lemat von Neumanna, redukcja do przypadku łańcucha pochłaniającego lub teoria uogólnionej odwrotności — patrz np. [KeSn 1–2], [Mey], [IsMa], [Se], [Io], [Pu]). Lemat 2.2 wykorzystuję ponadto do oszacowania wartości własnych laplasjanu Markowa (twierdzenia 2.6 i 2.7).

Z lematu 2.3 otrzymuję w prosty sposób rozwinięcia w lasy skierowane dla charakterystyk *ŁM*, które są rozwiązaniami układów równań liniowych związanych z podmacierzami $\mathbf{L}(R\big|R)$ laplasjanu Markowa $\mathbf{L}$.

Niektóre rozwinięcia w lasy skierowane były już znane — nowe są tylko dowody. Tak jest dla rozkładu stacjonarnego (twierdzenie 2.1 (2) (a) — patrz np. [Al 3], [FrWe 1–2]), średniego czasu dojścia do ustalonego zbioru stanów R (twierdzenie

2.4 (3) — patrz [FrWe 1–2]), czy rozkładu prawdopodobieństwa w chwili dojścia do zbioru R (twierdzenie 2.4 (2) — patrz [FrWe 1–2]). Z kolei rozwinięcia w lasy skierowane dla macierzy granicznej (twierdzenie 2.3) są lepsze od rozwinięć znanych w literaturze (patrz np. [LeRi 1–2], [AnTs]). Natomiast pozostałe rozwinięcia (twierdzenie 2.4 (1) i (3)) wydają się być wcześniej nieznane.

W dalszej części pracy wykorzystuję rozwinięcia w lasy skierowane do konstrukcji i analizy algorytmów obliczających charakterystyki *ŁM*. Idea jest następująca. Korzystając ze wzorów Cramera można przedstawić rozwiązanie układu równań liniowych w postaci ilorazu wyznaczników. Można by następnie rozwijać wyznaczniki (z definicji) w sumy po permutacjach. W ten sposób otrzymalibyśmy bezpośrednie wzory na rozwiązanie układu równań liniowych, ale byłyby to wzory z wieloma "plusami" i "minusami". Rozwinięcia w lasy skierowane dla dowolnego rozwiązania układu równań liniowych związanego z podmacierzami głównymi laplasjanu Markowa nie mają "minusów" wcale albo mają ich niewiele. Dlatego lepiej nadają się do różnego rodzaju obliczeń i oszacowań.

Rozwinięcia w lasy skierowane jako metoda oszacowań były już wcześniej używane (np. [BoMa], [Ta], [FrWe 1–2], [We], [Se], [Tw], [HwSh 1–2], [ChiCho 1–4], [Ca], [DeKuKu]) — nowa jest ogólność rozważań i zakres zastosowań metody.

1.4. W rozdziale 3., w twierdzeniu 3.1 wykorzystuję lemat 2.3 do oszacowania wpływu zaburzenia (wywołanego reprezentacją zmiennoprzecinkową) laplasjanu Markowa $\mathbf{L}$ i nieujemnego wektora $\mathbf{b} = (b_k)_{k\in S\setminus R}$ na rozwiązanie układu równań liniowych postaci

$$\mathbf{L}(R|R)\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{1.1}$$

lub

$$\mathbf{L}^T(R|R)\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{1.2}$$

Dzięki temu mogę oszacować wpływ zaburzenia laplasjanu Markowa na charakterystyki *ŁM*.

W dalszej kolejności przedstawiam algorytmy 3.1 i 3.2 rozwiązujące układy (1.1) i (1.2). Są to uogólnienia wariantów metody eliminacji Gaussa, skonstruowanych odpowiednio dla:

— obliczania rozkładu stacjonarnego *ŁM* o nieprzywiedlnej macierzy przejścia (Grassmann, Taksar i Heyman [GrTaHe]) oraz
— obliczania średniego czasu dojścia do ustalonego zbioru stanów $R \subseteq S$ (Heyman i Reeves [HeRe]).

Algorytmy 3.1 i 3.2 nie wykonują odejmowania, dlatego też są dokładniejsze od metody eliminacji Gaussa. Na końcu rozdziału 3. (twierdzenie 3.5) podaję oszacowania względnego błędu rozwiązania (*entrywise relative error*) algorytmów 3.1 i 3.2.

Szczególnym przypadkiem mojego wyniku jest oszacowanie względnego błędu rozwiązania dla algorytmu Grassmanna, Taksara i Heymana podane przez O'Cinneide'a [O'C 1].

Powodem zainteresowania algorytmami rozważanymi w tej części pracy są wymagania dużej dokładności, stawiane programom komputerowym, które automatycznie projektują i analizują modele kolejkowe występujące w informatyce i telekomunikacji (patrz np. [HeRe], [Gr], [O'C 1]).

1.5. W rozdziale 4. rozważam rodzinę *potęgowo zaburzonych* laplasjanów Markowa $\mathbf{L}(\varepsilon)$ i wektorów nieujemnych $\mathbf{b}(\varepsilon)$, $\varepsilon \in (0, \varepsilon_1)$, wyznaczoną przez macierz $\mathbf{\Delta} = (\delta_{ij})_{i,j\in S}$, gdzie $\delta_{ij} \neq 0$ dla $i, j \in S$, macierz $\mathbf{D} = (d_{ij})_{i,j\in S}$, zbiór $R \subset S$ oraz wektory $\boldsymbol{\zeta} = (\zeta_k)_{k\in S\setminus R}$, $\mathbf{z} = (z_k)_{k\in S\setminus R}$ spełniające następujący warunek:

dla dowolnych $i, j \in S,\ i \neq j,\ k \in S \setminus R$

$$-l_{ij}(\varepsilon) = \delta_{ij}\varepsilon^{d_{ij}} + o(\varepsilon^{d_{ij}}) \quad \text{oraz} \tag{1.3}$$

$$b_k(\varepsilon) = \zeta_k\varepsilon^{z_k} + o(\varepsilon^{z_k}), \quad \text{przy } \varepsilon \to 0.\ ^{1)}$$

Rodzina ta zawiera, występującą często w literaturze, rodzinę liniowo zaburzonych *ŁM*, tj. rodzinę, której elementy są postaci

$$\mathbf{L}(\varepsilon) = \mathbf{L}_0 + \varepsilon\mathbf{L}_1 \quad \text{oraz} \quad \mathbf{b}(\varepsilon) = \mathbf{b}_0 + \varepsilon\mathbf{b}_1,$$

gdzie $\mathbf{L}_0$ i $\mathbf{L}_1$ są laplasjanami Markowa oraz $\mathbf{b}_0$ i $\mathbf{b}_1$ — nieujemnymi wektorami $s - |R|$ wyrazowymi.

[1]) Jeżeli dla dostatecznie małych ε, $l_{ij}(\varepsilon) = 0$ (odpowiednio $b_k(\varepsilon) = 0$), to przyjmiemy dla jednolitości rozważań $\delta_{ij} := 0$, $d_{ij} := \infty$ (odpowiednio $\zeta_k := 0$, $z_k := \infty$).

Z lematu 2.3 wynika, że istnieją wektory $\boldsymbol{\alpha} := (\alpha_k)_{k\in S\setminus R}$ oraz $\mathbf{a} := (a_k)_{k\in S\setminus R}$ takie, że rozwiązanie $\mathbf{x}(\varepsilon) := (x_k(\varepsilon))_{k\in S\setminus R}$ zaburzonego układu równań

$$\mathbf{L}(R|R)(\varepsilon)\mathbf{x}(\varepsilon) = \mathbf{b}(\varepsilon) \quad \text{lub} \quad \mathbf{L}^T(R|R)(\varepsilon)\mathbf{x}(\varepsilon) = \mathbf{b}(\varepsilon)$$

jest postaci

$$x_k(\varepsilon) = \alpha_k\varepsilon^{a_k} + o(\varepsilon^{a_k}), \quad \text{przy } \varepsilon \to 0, k \in S \setminus R.$$

Głównym rezultatem tego rozdziału jest podanie algorytmów obliczających efektywnie i dokładnie wektory $\boldsymbol{\alpha}$ oraz $\mathbf{a}$ za pomocą parametrów $\boldsymbol{\Delta}, \mathbf{D}, \boldsymbol{\zeta}, \mathbf{z}$ (algorytmy 4.1–4.7). Algorytmy 4.1 i 4.2 są uogólnieniami algorytmów 3.1 i 3.2. Algorytmy 4.3–4.6 grupują iteracyjnie stany $\mathit{ŁM}$ należące do tej samej klasy zamkniętej w pewnych grafach zależnych od $\mathbf{D}$, a następnie rozwiązują układy równań liniowych ograniczone do poszczególnych klas. W dowodach poprawności tych algorytmów wykorzystuję lemat 2.3. Najbardziej złożonym algorytmem w tej pracy jest algorytm 4.7, który wykorzystuje jako procedury algorytmy rozważane poprzednio do obliczania współczynników pierwszego wyrazu rozwinięcia macierzy granicznej.

Wyniki tej części pracy są uogólnieniem i rozwinięciem rezultatów:

— Schweitzera [Sch 1–3], gdzie podano algorytm dla kolejnych wyrazów rozwinięcia rozkładu stacjonarnego liniowo zaburzonego nieprzywiedlnego $\mathit{ŁM}$,
— Hassima i Haviva [HasHav], gdzie podano algorytm dla rzędów wielkości średnich czasów przejścia między stanami w przypadku liniowo zaburzonej, nieprzywiedlnej macierzy przejścia,
— Desai i Kumarów [DeKuKu], gdzie podano algorytm dla rzędów wielkości rozkładu stacjonarnego pewnych łańcuchów Markowa zaburzonych potęgowo.

Motywacją dla rozważań w tej części pracy są m.in.:

— potrzeby przybliżonego obliczania charakterystyk $\mathit{ŁM}$ zadanych przez duże, rozrzedzone macierze przejścia (generatory), których elementy mają zróżnicowane rzędy wielkości, oraz
— potrzeby analizy modeli markowowskich w zależności od pewnego parametru

(patrz np. [Sch 1–3], [HasHav], [HavRi], [BiFi], [BiSt], [RoWi 1–2]).

1.6. W dwóch ostatnich rozdziałach analizuję asymptotyczne zachowanie algorytmów adaptacyjnych Monte Carlo dla całkowania i poszukiwania minimum funkcji określonej na zbiorze skończonym. Algorytmy takie generują *ŁM*, czyli błądzenie losowe po dziedzinie funkcji zależne od jej wartości.

Na wstępie rozdziału 5. (wniosek 5.1, stwierdzenia 5.1–5.2) szacuję błąd estymacji całki dowolnej funkcji $f : S \to \mathbb{R}$ względem rozkładu stacjonarnego $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)_{i\in S}$ odwracalnego łańcucha Markowa za pomocą średniej po trajektorii

$$\bar{f}_t(\omega) := \frac{1}{t}\sum_{j=0}^{t-1} f(X_j(\omega)),\ \omega \in \Omega.$$

Z kolei rozważam rodzinę odwracalnych laplasjanów Markowa z czasem dyskretnym $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$, indukowaną przez taką macierz $\mathbf{D} = (d_{ij})_{i,j\in S}$, że dla $i, j \in S$, $i \neq j$,

$$-\, l_{ij}(\varepsilon) = \Theta(\varepsilon^{d_{ij}}) \quad \text{przy } \varepsilon \to 0. \tag{1.4}$$

W twierdzeniu 5.2 dowodzę, że wartości własne laplasjanów z rodziny (1.4) spełniają asymptotyczne równości

$$\lambda_k(\varepsilon) = \Theta(\varepsilon^{v_k(\mathbf{D})}) \quad \text{przy } \varepsilon \to 0,$$

gdzie $k = 2, \ldots, s$ oraz stałe $v_k(\mathbf{D})$ wyrażają się za pomocą rozwinięć w lasy skierowane. W dowodzie korzystam z oszacowań wartości własnych podanych w twierdzeniu 2.6.

Oba powyższe wyniki wykorzystuję do oszacowania błędu estymacji całki względem rozkładu stacjonarnego laplasjanów z rodziny (1.4) za pomocą średniej po trajektorii $\bar{f}_t^{\varepsilon}$ (twierdzenie 5.3), np. błąd L_p jest rzędu

$$O(\varepsilon^{-v_2(\mathbf{D})/2}), \quad \text{przy } \varepsilon \to 0,$$

oraz rzędu

$$O(t^{-1/2}), \quad \text{przy } t \to \infty.$$

W ostatniej części rozdziału 5. wykorzystuję twierdzenie 5.3 do analizy błędu algorytmów Monte Carlo dla całkowania funkcji. Ponadto pokazuję, że w dużej rodzinie odwracalnych *ŁM*, zawierającej m.in. algorytm Metropolisa, algorytm Barkera i próbnik Gibbsa, każdy parametr $v_k(\mathbf{D})$ jest stały. Algorytmy te są używane od ponad 40 lat do estymacji globalnych charakterystyk w modelach mechaniki

statystycznej (patrz np. [Me et al.], [So], [Gi], [Wel]). Moje wyniki potwierdzają doświadczenie numeryczne wskazujące na podobną efektywność powyższych algorytmów w granicy niskich temperatur ($\varepsilon \to 0$).

Rezultaty tego rozdziału są uogólnieniem wyników Ingrassi [In], gdzie oszacowano drugą wartość własną dla algorytmu Metropolisa i próbnika Gibbsa w przypadku regularnej struktury grafu $g(\mathbf{L})$ oraz wzmocnieniem wyników Chianga i Chowa [ChiCho 4], gdzie udowodniono logarytmiczną równoważność wartości własnych algorytmu Metropolisa i próbnika Gibbsa.

1.7. Rozdział 6. jest poświęcony niejednorodnym *ŁM* z czasem dyskretnym (są to łańcuchy, których macierze przejścia zmieniają się w czasie). Na wstępie uogólniam pojęcia klasy zamkniętej, klasy powracającej, stanu powracającego oraz podaję podstawowe własności wprowadzonych pojęć. Następnie wprowadzam klasę niejednorodnych *ŁM* indukowanych przez macierz $\mathbf{D} = (d_{ij})_{i,j\in s}$ oraz ciąg $(\varepsilon_t)_{t\geq 0}$ takie, że dla $i, j \in S$, $i \neq j$, $d_{ij} \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$, $\varepsilon_t \searrow 0$ przy $t \to \infty$ oraz

$$\mathbf{Pr}\{X_{t+1} = j \big| X_t = i\} = \Theta(\varepsilon_t^{d_{ij}}) \quad \text{przy } t \to \infty. \tag{1.5}$$

Rodzina ta zawiera m.in. łańcuchy jednorodne oraz łańcuchy generowane przez Simulated Annealing — stochastyczny algorytm optymalizacyjny. Algorytm ten jest używany od 1982 roku przez firmy półprzewodnikowe do projektowania układów scalonych o wysokim stopniu integracji (*VLSI*) (patrz np. [KiGeVe], [LaAa], [RomSa], [Sor]).

Głównym rezultatem tego rozdziału jest twierdzenie 6.1, w którym opisuję klasy powracające i stany powracające łańcuchów postaci (1.5) za pomocą rozwinięć w lasy skierowane, które zależą od macierzy $\mathbf{D}$ oraz pewnej liczby zależnej od ciągu $(\varepsilon_t)_{t\geq 0}$. Powyższy wynik wykorzystuję do charakteryzacji warunków osiągalności, z prawdopodobieństwem 1, minimum globalnego przez Simulated Annealing (wniosek 6.2). Jest to jedynie analiza asymptotycznej poprawności algorytmu, ponieważ Simulated Annealing generuje skomplikowany *ŁM* postaci (1.4), którego zachowanie "w czasie skończonym" nie jest znane.

Wyniki tego rozdziału są uogólnieniem rezultatów Connorsa i Kumara ([Con], [ConKu 1–2]), gdzie scharakteryzowano osiągalność, z prawdopodobieństwem 1,

minimum globalnego przez "słabo odwracalny" Simulated Annealing oraz są częściowo oparte na mojej pracy magisterskiej [Po] oraz na wspólnej pracy z W. Niemiro [NiPo].

1.8. Wyniki rozdziału 3. i 4. dotyczą układów równań liniowych związanych z odwracalnymi macierzami postaci $L(R|R)$, gdzie L jest laplasjanem Markowa. Korzystając z definicji zawartych w monografii Horna i Johnsona [HoJo 2, rozdział 2], lematu 2.2 oraz wniosku 2.3 można pokazać, że macierz A jest odwracalną podmacierzą główną laplasjanu Markowa wtedy i tylko wtedy, gdy A jest diagonalnie dominującą M-macierzą.

2. Lasy skierowane i łańcuchy Markowa.

2.1. **Podstawowe definicje i stwierdzenia.**

Niech S będzie ustalonym, niepustym zbiorem skończonym oraz $E \subseteq S \times S$. Załóżmy dla wygody, że $S = \{1, 2, \ldots, s\}$. Parę $g := (S, E)$ nazywać będziemy *grafem skierowanym o zbiorze wierzchołków (stanów)* S i zbiorze *krawędzi* E. Graf g, w którym $E = S \times S$ nazywać będziemy *zupełnym*.

Podgrafem g_1 grafu g nazywać będziemy parę (S_1, E_1) taką, że $S_1 \subseteq S$ oraz $E_1 \subseteq E \cap (S_1 \times S_1)$. Jeśli $S_1 = S$ to podgraf g_1 grafu g nazywać będziemy *rozpinającym*.

Będziemy mówić, że stan $j \in S$ jest *osiągalny* ze stanu $i \in S$ lub równoważnie: istnieje *droga* ze stanu i do j (oznaczenie $i \to j$), jeżeli $i = j$ lub istnieje liczba $n \geq 2$ oraz ciąg stanów $i = i_1, i_2, \ldots, i_n = j$ taki, że $i_k \in S$ oraz $(i_k, i_{k+1}) \in E$ dla $k = 1, \ldots, n-1$. *Cyklem* nazywać będziemy drogę z danego stanu do tego samego stanu.

Stan $i \in S$ będziemy nazywać *istotnym*, jeśli dla dowolnego $j \in S$ z warunku $i \to j$ wynika, że $j \to i$. W przeciwnym przypadku stan i będziemy nazywać *nieistotnym*. Stan $i \in S$ będziemy nazywać *pochłaniającym*, jeśli nie istnieje $j \in S$, $j \neq i$ taki, że $i \to j$. Jeśli $i \to j$ oraz $j \to i$, to powiemy, że stany i, j *komunikują się* ze sobą $(i \leftrightarrow j)$.

Graf g nazywać będziemy *silnie spójnym*, jeżeli dla dowolnych $i, j \in S$, $i \to j$. Graf g nazywać będziemy *słabo spójnym*, jeżeli istnieje $j \in S$ taki, że dla dowolnego $i \in S$, $i \to j$.

Niepusty podzbiór M zbioru stanów S nazywać będziemy *zbiorem zamkniętym*, w grafie $g = (S, E)$, jeśli nie istnieją stany $i \in M$, $j \in S \setminus M$ takie, że $(i, j) \in E$. *Klasą zamkniętą* w g nazywać będziemy minimalny w sensie inkluzji zbiór zamknięty w g.

Lasem skierowanym rozpinającym w g, lub po prostu *lasem*, nazywać będziemy podgraf skierowany bez cykli $f := (S, E_f)$ grafu g, w którym z każdego wierzchołka wychodzi co najwyżej jedna krawędź. Zbiór wierzchołków $R \subseteq S$, z których nie wychodzi żadna krawędź lasu f nazywać będziemy *korzeniem* f. Las o korzeniu jednoelementowym nazywać będziemy *drzewem skierowanym rozpinającym*. Łatwo zauważyć, że korzeń R lasu f jest zawsze niepusty oraz, że dla dowolnego $i \notin R$ istnieje dokładnie jedna droga prowadząca ze stanu i do pewnego stanu $j \in R$. Tam, gdzie nie będzie prowadziło to do nieporozumienia, las f będziemy utożsamiać ze zbiorem

jego krawędzi E_f. Rysunek 1.1.1 w Dodatku przedstawia pewien graf skierowany g. Stany są reprezentowane jako kółka, natomiast krawędzie jako strzałki. Rysunek 1.1.2 przedstawia las skierowany o korzeniu R w grafie g.

Zbiór wszystkich lasów zawartych w g, o korzeniu R, oznaczać będziemy $F(R)$, przy czym pisać będziemy $F(i_1, i_2, \ldots, i_m)$ zamiast $F(\{i_1, i_2, \ldots, i_m\})$. Dla $i \notin R$ oraz $j \in R$, $F_{ij}(R)$ oznaczać będzie podzbiór $F(R)$ składający się z lasów o korzeniu R, w których istnieje droga prowadząca z wierzchołka i do j. Jeżeli $i \in R$, to przyjmiemy dla jednolitości rozważań, że $F_{ii}(R) := F(R)$.

Niech $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j \in S}$ będzie macierzą kwadratową wymiaru $s \times s$ ($s \geq 2$) nad ciałem liczb zespolonych $\mathbb{C}$. *Grafem skierowanym ważonym, indukowanym* przez $\mathbf{A}$, nazywać będziemy macierz $\mathbf{A}$ wraz z grafem $g(\mathbf{A}) := (S, E)$, gdzie $E = \{(i,j) \in S \times S : \ a_{ij} \neq 0\}$. *Wagą multiplikatywną* lasu $f = (S, E_f)$, w grafie $g(\mathbf{A})$, nazywać będziemy liczbę

$$w(f) := \prod_{(i,j) \in E_f} (-a_{ij}) \qquad (\text{przyjmiemy } w((S, \emptyset)) := 1).$$

Wagą zbioru lasów F, w grafie $g(\mathbf{A})$, nazywać będziemy liczbę

$$w(F) := \sum_{f \in F} w(f) \qquad (\text{przyjmiemy } w(\emptyset) := 0).$$

Jeśli $F = F(R)$ dla pewnego $R \subseteq S$, to pisać będziemy $w(R)$ zamiast $w(F(R))$, ponieważ ustalony zbiór $R \subseteq S$ wyznacza jednoznacznie zbiór wszystkich lasów o korzeniu R. Przyjmijmy ponadto dla $i \in S$, $j, k \in S \setminus R$, $l \in R$, $w(i) := w(\{i\})$, $w_{jk}(R, k) := w[F_{jk}(R \cup \{k\})]$ oraz $w_{kl}(R) := w[F_{kl}(R)]$.

Macierz $\mathbf{A}$ nazywać będziemy *nieprzywiedlną*, jeśli nie istnieje macierz permutacji $\mathbf{B}$ oraz macierze kwadratowe $\mathbf{A}_{11}$ i $\mathbf{A}_{22}$ takie, że

$$\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{0} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix}.$$

Macierz $\mathbf{A}$ nazywać będziemy *jednoklasową*, jeśli nie istnieje macierz permutacji $\mathbf{B}$ oraz macierze kwadratowe $\mathbf{A}_{11}$, $\mathbf{A}_{22}$ i $\mathbf{A}_{33}$ takie, że

$$\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_{22} & \\ \mathbf{A}_{31} & \mathbf{A}_{32} & \mathbf{A}_{33} \end{bmatrix}.$$

Łatwo udowodnić następujące stwierdzenia.

Stwierdzenie 2.1.

(1) *Każdy graf ma przynajmniej jedną klasę zamkniętą.*
(2) *Każdy graf ma przynajmniej jeden stan istotny.*

Stwierdzenie 2.2.

(1) *Relacja "$\leftrightarrow$" jest relacją równoważności.*
(2) *$M \subseteq S$ jest klasą zamkniętą wtedy i tylko wtedy, gdy M jest klasą abstrakcji relacji "$\leftrightarrow$" złożoną ze stanów istotnych;*
(3) *Stan $i \in S$ jest istotny wtedy i tylko wtedy, gdy i należy do pewnej klasy zamkniętej $M \subseteq S$.*

Stwierdzenie 2.3. *Niech $\mathbf{A}$ będzie macierzą $s \times s$. Wtedy następujące warunki są równoważne.*

(1) *$\mathbf{A}$ jest nieprzywiedlna.*
(2) *$g(\mathbf{A})$ jest silnie spójny.*
(3) *W grafie $g(\mathbf{A})$ dla dowolnych stanów $i, j \in S$, $i \to j$.*
(4) *W grafie $g(\mathbf{A})$ dla dowolnego stanu $j \in S$, istnieje drzewo o korzeniu j.*
(5) *S jest klasą zamkniętą.*

Stwierdzenie 2.4. *Niech $\mathbf{A}$ będzie macierzą $s \times s$. Wtedy następujące warunki są równoważne.*

(1) *$\mathbf{A}$ jest jednoklasowa.*
(2) *$g(\mathbf{A})$ jest słabo spójny.*
(3) *W grafie $g(\mathbf{A})$ istnieje stan $j \in S$ taki, że dla dowolnego $i \in S$, $i \to j$.*
(4) *W grafie $g(\mathbf{A})$ dla pewnego stanu $j \in S$, istnieje drzewo o korzeniu j.*
(5) *W grafie $g(\mathbf{A})$ istnieje dokładnie jedna klasa zamknięta $M \subseteq S$.*

Stwierdzenie 2.5. *Niech $\mathbf{A}$ będzie macierzą $s \times s$, której elementy niediagonalne są rzeczywiste i niedodatnie oraz niech $R \subseteq S$. Wtedy następujące warunki są równoważne.*

(1) *W grafie $g(\mathbf{A})$ istnieje las o korzeniu R.*
(2) *$w(R) \neq 0$.*

(3) $w(R) > 0$.

Ze stwierdzenia 2.2 wynika, że zbiór stanów grafu $g(\mathbf{A})$ można podzielić na $m \geq 1$ klas zamkniętych C_k $(k = 1, \ldots, m)$ oraz, być może pusty, zbiór stanów nieistotnych T. Jeśli przyjmiemy $C = C_1 \dot{\cup} \ldots \dot{\cup} C_m$ [2]), to C będzie zbiorem stanów istotnych oraz $S = C \dot{\cup} T$. Po przenumerowaniu wszystkich stanów w ten sposób, że stany istotne należące do tej samej klasy zamkniętej oznaczane są kolejnymi numerami oraz stany nieistotne mają większe numery od stanów istotnych, macierz $\mathbf{A}$ można przedstawić w *postaci kanonicznej*:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 & & & \mathbf{0} & \\ & \mathbf{A}_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & \mathbf{0} & & \mathbf{A}_m & \\ \mathbf{B}_1 & \mathbf{B}_2 & \ldots & \mathbf{B}_m & \mathbf{B}_{m+1} \end{bmatrix}, \tag{2.1}$$

gdzie $\mathbf{A}_k$ $(k = 1, \ldots, m)$ jest nieprzywiedlną podmacierzą kwadratową macierzy $\mathbf{A}$, odpowiadającą krawędziom między stanami należącymi do klasy C_k, podmacierz $\mathbf{B}_k$ odpowiada krawędziom między stanami nieistotnymi a stanami istotnymi z klasy C_k, natomiast podmacierz kwadratowa $\mathbf{B}_{m+1}$ odpowiada krawędziom między stanami nieistotnymi. Na pozostałych miejscach macierzy $\mathbf{A}$ znajdują się zera.

Poniższy algorytm, napisany w notacji "pseudopascalowej", znajduje podział zbioru S na klasy zamknięte i zbiór stanów nieistotnych w grafie $g = (S, E)$. Będziemy go wykorzystywać do sprowadzania macierzy do postaci kanonicznej oraz w algorytmach rozdziału 4. jako procedurę. Jest to uogólnienie algorytmu Foxa i Landiego [FoLa], [Pu, str. 590], który sprowadza macierz stochastyczną do postaci kanonicznej. Ze względu na łatwość obliczeń na liczbach binarnych, graf g reprezentujemy w postaci *macierzy sąsiedztwa* $\mathbf{A}(g) := (a_{ij})_{i,j \in S}$ takiej, że $a_{ij} = 1$ jeśli $(i, j) \in E$ oraz $a_{ij} = 0$ w przeciwnym przypadku.

[2]) Symbol "$\dot{\cup}$" oznaczać będzie sumę zbiorów rozłącznych

Algorytm 2.1.

input: Graf skierowany (S, E) w postaci macierzy sąsiedztwa $(a_{ij})_{i,j\in S}$ bez elementów diagonalnych.
output: Klasy zamknięte w grafie (S, E).
begin
$U := S$; $W := S$;
for $i \in S$ **do** $S(i) := \{i\}$;

{ U oznacza zbiór stanów, o których nie wiadomo, czy są nieistotne, czy też są istotne i należą do pewnej klasy zamkniętej. W oznacza roboczą przestrzeń stanów nie sklasyfikowanych. Zbiory $S(i)$, gdzie $i \in W$, tworzą podział zbioru S. Zapisywane do pliku "output" elementy tego podziału są klasami zamkniętymi w grafie (S, E) }

while $U \neq \emptyset$ **do begin**
Wybierz $i \in W$; $k := 0$; $i_k := i$;
while i_k nie jest pochłaniający **do begin**

{ Konstruujemy drogę, która albo prowadzi do stanu pochłaniającego w roboczym grafie związanym z W, albo jest cyklem }

Wybierz $j \in W$ takie, że $j \neq i_k$ oraz $a_{i_k j} = 1$;
$k := k + 1$; $i_k := j$;
if istnieje $0 \leq r < k$ takie, że $i_k = i_r$
then begin

{ Scalamy cykl $(i_r, \ldots, i_k)$ w jeden stan i_r }

for $j \in W$, $j \neq i_r$ **do begin**

$a_{i_r j} := a_{i_r j}$ **or** $\ldots$ **or** $a_{i_k j}$;

$a_{j i_r} := a_{j i_r}$ **or** $\ldots$ **or** $a_{j i_k}$

end;
$S(i_r) := S(i_{r+1}) \cup \ldots \cup S(i_k)$;
$W := W \setminus \{i_{r+1}, \ldots, i_k\}$
end
end;

```
      write (S(i_k));    U := U \ S(i_k);   I := {i_k};
      while I ≠ ∅ do begin
       { Usuwamy stany nieistotne osiągające S(i_k) }
         J := ∅;
         for i ∈ I, j ∈ W \ I takich, że a_ji = 1 do begin
            U := U \ S(j);     J := J ∪ {j}
         end;
         I := J
      end
   end
end.
```

Łatwo zauważyć, że algorytm 2.1 znajduje wszystkie klasy zamknięte w grafie kosztem $O(s^2)$ działań arytmetycznych.

Laplasjanem nazywać będziemy dowolną macierz $\mathbf{L} := (l_{ij})_{i,j=1}^{s}$ nad ciałem $\mathbb{C}$ taką, że $l_{ii} = -\sum_{j:\, j\neq i} l_{ij}$ dla $i = 1, \ldots, s$.

Niech dana będzie przestrzeń probabilistyczna $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{Pr})$ oraz łańcuch Markowa (*ŁM*) $X = (X_t)_{t\geq 0}$ określony na $(\Omega, \mathcal{F})$ o przestrzeni stanów S. Łańcuchy Markowa wprowadza się najczęściej za pomocą macierzy przejścia $\mathbf{P} = (p_{ij})_{i,j\in S}$ (w przypadku czasu dyskretnego) lub generatora $\mathbf{Q} = (q_{ij})_{i,j\in S}$ (w przypadku czasu ciągego). Niech $\mathbf{I}_k$ (indeks k będziemy czasami pomijać dla wygody) oznacza macierz jednostkową rzędu $k\times k$, natomiast. $\mathbf{0}_{k\times k}$ — macierz zerową rzędu $k\times k$. Łatwo zauważyć, że macierze $\mathbf{L}(\mathbf{P}) = \mathbf{I} - \mathbf{P}$ oraz $\mathbf{L}(\mathbf{Q}) = -\mathbf{Q}$ są laplasjanami indukowanymi przez $\mathbf{P}$ oraz $\mathbf{Q}$. Wiele z podanych dalej faktów nie zależy od tego, czy czas jest ciągły czy dyskretny, dlatego też dla jednolitości rozważań łańcuch Markowa będziemy wprowadzać za pomocą *laplasjanu Markowa* tzn. laplasjanu, którego elementy niediagonalne są rzeczywiste i niedodatnie.

Stan i nazywać będziemy *powracającym*, jeżeli $\mathbf{Pr}\{\exists_{t>0} X_t = i \,\big|\, X_0 = i\} = 1$. W przeciwnym przypadku stan i nazywać będziemy *chwilowym*.

Można pokazać ([Io] rozdział 2 oraz punkt 8.4.2), że stan i jest powracający wtedy i tylko wtedy, gdy jest istotny w grafie indukowanym przez laplasjan Markowa, dlatego klasy zamknięte w grafie $g(\mathbf{L})$ nazywać będziemy również *klasami powracającymi*, natomiast zbiór stanów nieistotnych — *zbiorem stanów chwilowych*.

Uwagi 2.1.

(1) W literaturze angielskiej (np. [BrRy], [Che], [Cha]) las skierowany nazywany bywa różnie: "directed forest", "arborescence" albo "branching". Czasami definiuje się las skierowany tak, że krawędzie skierowane są nie "do" lecz "od" korzenia.

(2) Podane przez nas definicje stanu istotnego, stanu pochłaniającego, zbioru i klasy zamkniętej są uogólnieniami definicji znanych dla łańcuchów Markowa (np. [Io], [IsMa], [KeSn 1–2], [Se]). Ogólność tych pojęć będzie wykorzystywana w rozdziałach 4. i 6.

(3) Uzasadnieniem nazwy "laplasjan" jest fakt, że macierze o tej własności pojawiają się przy rozwiązywaniu równań różniczkowych cząstkowych z operatorem Laplace'a. Symetryczne laplasjany Markowa występują w kombinatoryce (np. [CvDoSa], [Gr], [Mo]). Za pomocą wartości własnych takich macierzy można szacować różne kombinatoryczne wielkości związane z grafami obciążonymi. Laplasjany występują również w teorii sieci elektrycznych pod nazwami "admittance matrix" lub "Kirchhoff matrix" (np. [Che], [Mo]).

2.2. **Rozwinięcia w lasy skierowane dla dopełnień algebraicznych laplasjanu.**

Dla ustalonego korzenia $R \subseteq S$ oraz lasu $f \in F(R)$ zdefiniujemy funkcję $\rho_f : S \to R$ taką, że $\rho_f(i) = j$ wtedy i tylko wtedy, gdy istnieje droga zawarta w f o początku w wierzchołku i oraz końcu w wierzchołku j. Inaczej mówiąc $\rho_f(i)$ jest tym korzeniem lasu f, z którego "wyrósł sęk" i. Z definicji $\rho_f\big|R \equiv \mathrm{id}_R$.

Ustalmy podzbiory U, W zbioru S takie, że $|U| = |W|$ [3]). Niech $F(W \to U)$ oznacza zbiór złożony z tych lasów f o korzeniu U, dla których funkcja $\rho_f\big|W$ jest wzajemnie jednoznaczna. Oczywiście $F(W \to U) \subseteq F(U)$ oraz jeżeli $U = W$, to $F(W \to U) = F(U)$.

Dla ustalonego lasu $f \in F(W \to U)$, symbolem $\mathrm{inv}(\rho_f\big|W)$ oznaczać będziemy liczbę przestawień funkcji ρ_f zawartych w W, a więc

$$\mathrm{inv}(\rho_f\big|W) := \big|\{\{i,j\} \in W : \ i < j, \ \rho_f(i) > \rho_f(j)\}\big|.$$

[3]) Symbol $|U|$ oznacza liczność zbioru U

Niech ponadto $\operatorname{sgn}(f\big|W) := (-1)^{\operatorname{inv}(\rho_f|W)}$.

Dla ustalonych $U, W \subseteq S$ oraz macierzy kwadratowej $\mathbf{A}$ wymiaru $s \times s$, symbolem $\mathbf{A}(U\big|W)$ oznaczać będziemy macierz powstałą z macierzy $\mathbf{A}$ przez usunięcie wierszy o indeksach ze zbioru U i kolumn o indeksach ze zbioru W. Będziemy pisać $\mathbf{A}_{ij}$ zamiast $\mathbf{A}(\{i\}\big|\{j\})$. Dopełnieniem algebraicznym macierzy $\mathbf{A}(U\big|W)$ nazywać będziemy liczbę

$$C_{\mathbf{A}}(U\big|W) := (-1)^{\sum_{i\in U} i + \sum_{j\in W} j} \det \mathbf{A}(U\big|W).$$

Niech ponadto $\mathbf{e}_s$ oznacza wektor złożony z s jedynek, natomiast $\mathbf{0}_s$ — wektor złożony z s zer.

Poniższe lematy pozwalają przedstawić ważne charakterystyki łańcucha Markowa w postaci funkcji wymiernych od wag pewnych zbiorów lasów.

Lemat 2.1. *(All Cofactors Matrix–Tree Theorem) Dla dowolnego laplasjanu* $\mathbf{L}$ *rzędu* $s \times s$ *oraz zbiorów* $U, W \subseteq S$ *takich, że* $|U| = |W|$ *zachodzi równość*

$$C_{\mathbf{L}}(U\big|W) = \sum_{f\in F(W\to U)} \operatorname{sgn}(f\big|W) w(f). \tag{2.2}$$

Dowód. Dowód równoważnej postaci tego lematu można znaleźć w pracy Chaikena [Cha]. □

Lemat 2.2. *Niech* $\mathbf{L}$ *będzie dowolnym laplasjanem rzędu* $s\times s$, $R \subseteq S$ *oraz* $i, j \notin R$. *Wtedy:*

(1) *(Fiedler i Sedlácek — [FieSe])*

$$\det \mathbf{L}(R\big|R) = w(R); \tag{2.3}$$

(2)

$$C_{\mathbf{L}}(R \dot\cup \{j\}\big|R \dot\cup \{i\}) = (-1)^u w_{ij}(R, j), \tag{2.4}$$

gdzie $u := \big|\{k \in R :\ \min(i,j) < k < \max(i,j)\}\big|$.

Dowód. (1) Dla dowolnego $f \in F(R \to R)$ mamy $\rho_R \equiv \mathrm{id}_R$, stąd $\mathrm{inv}(\rho_f \big| R) = 0$ oraz $\mathrm{sgn}(f\big|R) = 1$. Ponadto $F(R \to R) = F(R)$ i oczywiście $\det \mathbf{L}(R\big|R) = C_{\mathbf{L}}(R\big|R)$. Stąd i z (2.2) wynika teza.
(2) Dla dowolnego $f \in F(R \,\dot\cup\, \{i\} \to R \,\dot\cup\, \{j\})$ mamy $\rho_f(i) = j$ oraz $\rho_f\big|R \equiv \mathrm{id}_R$, a zatem $\mathrm{inv}(\rho_f\big|R \cup \{i\}) \equiv \big|\{k \in R : \ \min(i,j) < k < \max(i,j)\}\big|$. Ponadto $F(R \,\dot\cup\, \{i\} \to R \,\dot\cup\, \{j\}) = F_{ij}(R, j)$. Stąd i z (2.2) wynika teza. □

W dalszym ciągu zakładać będziemy, że stany są ponumerowane w ten sposób, że $R = \{s - |R| + 1, \dots, s\}$. Założenie to nie ogranicza ogólności rozważań znacznie upraszczając rozumowanie.

Lemat 2.3. *Niech* $\mathbf{L}$ *będzie dowolnym laplasjanem rzędu* $s \times s$ *oraz* $R \subseteq S$. *Załóżmy, że w grafie* $g(\mathbf{L})$, $w(R) \neq 0$. *Wtedy*

$$\mathbf{L}(R\big|R)^{-1} = \left[\frac{w_{ij}(R,j)}{w(R)}\right]_{i,j \in S\setminus R}.$$

Dowód. Lemat wynika ze znanego wzoru

$$\mathbf{L}(R\big|R)^{-1} = \left[\frac{C_{\mathbf{L}}(R \,\dot\cup\, \{j\}\big|R \,\dot\cup\, \{i\})}{\det \mathbf{L}(R\big|R)}\right]_{i,j \in S\setminus R}$$

oraz lematu 2.2. □

Wniosek 2.1. *Niech* $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j=1}^{s-1}$ *będzie dowolną macierzą* $(s-1) \times (s-1)$ *oraz*

$$\mathbf{L} := \begin{bmatrix} \mathbf{A} & & \mathbf{l} \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}, \quad \textit{gdzie } \mathbf{l} = \left(-\sum_{j=1}^{s-1} a_{1j}, \dots, -\sum_{j=1}^{s-1} a_{s-1,j}\right)^T.$$

Niech ponadto $F(s)$, $F_{ij}(s,j)$ *oraz* $F(S \setminus R)$, *dla* $i, j = 1, \dots, s-1$ *oraz* $R \subseteq S$, *będą rodzinami lasów w grafie* $g(\mathbf{L})$. *Wtedy:*

(1) *(Bott i Mayberry — [BoMa])*
$\det \mathbf{A} = w(F(s))$;
(2) *rząd* $\mathbf{A}$ *jest równy mocy maksymalnego* $R \subseteq S$, *dla którego* $w(F(S \setminus R)) \neq 0$;
(3) *jeżeli* $w(F(s)) \neq 0$, *to*

$$A^{-1} = \left[\frac{w(F_{ij}(s,j))}{w(F(s))}\right]_{i,j=1}^{s-1}.$$

Dowód. Wniosek wynika bezpośrednio z części (1) lematu 2.2 oraz lematu 2.3. □

Wniosek 2.2. *Niech* $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j=1}^{s-1}$, $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_{s-1})^T$, $\mathbf{b} = (b_1, \ldots, b_{s-1})^T$, $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^{s-1}$ *oraz*

$$\mathbf{L} := \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{l} \\ -\mathbf{b}^T & b \end{bmatrix}, \quad \textit{gdzie}$$

$$\mathbf{l} := \left(-\sum_{j=1}^{s-1} a_{1j}, \ldots, -\sum_{j=1}^{s-1} a_{s-1,j} \right)^T \quad \textit{oraz} \quad b := \sum_{j=1}^{s-1} b_j.$$

Niech ponadto $F(i)$, $i \in S$ *będą rodzinami drzew w grafie* $g(\mathbf{L})$. *Wtedy:*

(1) *układ* $\mathbf{A}^T\mathbf{x} = \mathbf{b}$ *ma dokładnie jedno rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy* $w(F(s)) \neq 0$*;*

(2) *jeżeli* $w(F(s)) \neq 0$, *to* $x_i = w(F(i))/w(F(s))$.

Dowód. Część (1) wynika z wniosku 2.1 (1). Część druga wynika ze wzorów Cramera oraz wniosku 2.1 (3).

Wniosek ten można również udowodnić w następujący sposób. Z wniosku 2.1 (3) otrzymujemy dla $i = 1, \ldots, s-1$

$$x_i = \frac{-\sum_{j=1}^{s-1} w_{ji}(s,i) l_{sj}}{w(s)}.$$

Przyjmijmy $F(i\big|s \to j) := \{f \in F(i) : \ f \ni (s,j)\}$. Wtedy dla $i \in S \setminus \{s\}$

$$F(i) = \dot{\bigcup_{1 \leq j < s}} F(i\big|s \to j).$$

Są dwa możliwe przypadki.

(i) Jeżeli $F(i\big|s \to j) = \emptyset$, to $-l_{sj} = 0$. Zatem

$$w_{ij}(s,i)(-l_{sj}) = w(F(i\big|s \to j)) = 0.$$

(ii) Jeżeli $F(i\big|s \to j) \neq \emptyset$, to przekształcenie $\varphi : \ F(i\big|s \to j) \to F_{ij}(s,i)$ takie, że $\varphi(f) = f \setminus (s,j)$ jest wzajemnie jednoznaczne oraz $w(f) = w(\varphi(f))(-l_{sj})$. Zatem

$$w_{ji}(s,i)(-l_{sj}) = w(F(i\big|s \to j)).$$

Stąd

$$w(i) = -\sum_{j=1}^{s-1} w_{ji}(s,i) l_{sj}.$$

W rezultacie otrzymujemy dla $i = 1, \ldots, s-1$

$$x_i = \frac{w(i)}{w(s)}.$$

□

Ze stwierdzenia 2.5 oraz lematu 2.2 (1) otrzymujemy bezpośrednio następujący wniosek.

Wniosek 2.3. *Niech* $\mathbf{L}$ *będzie laplasjanem Markowa oraz* $R \subseteq S$. *Wtedy następujące warunki są równoważne:*

(1) *macierz* $\mathbf{L}(R\big|R)$ *jest odwracalna;*
(2) *w grafie* $g(\mathbf{L})$ *istnieje las o korzeniu* R.

Wniosek 2.4. *(Drugi wzór Cayleya) Załóżmy, że* g *jest grafem zupełnym. Wtedy*

$$|F(R)| = |R||S|^{|S|-|R|-1}. \tag{2.5}$$

Dowód. Zauważmy, że g jest grafem indukowanym przez laplasjan $\mathbf{L}$, którego elementy niediagonalne są równe -1. Ponadto dla dowolnego $R \subseteq S$, $w(R) = |F(R)|$ oraz

$$\mathbf{L}(R\big|R) = s\mathbf{I}_{s-r} - \mathbf{J}_{s-r}, \tag{2.6}$$

gdzie $r = |R|$ oraz $\mathbf{J}_{s-r}$ oznacza macierz kwadratową rzędu $(s-r) \times (s-r)$, której wszystkie elementy są równe 1. Stąd łatwo zauważyć, że jeżeli dodamy do pierwszego wiersza $\mathbf{L}(R\big|R)$ sumę pozostałych wierszy, a następnie odejmiemy pierwszą kolumnę od pozostałych kolumn, to otrzymamy macierz rzędu $s-r$ postaci:

$$\begin{bmatrix} r & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ -1 & s & 0 & \ldots & 0 \\ -1 & 0 & s & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ -1 & 0 & 0 & \ldots & s \end{bmatrix}.$$

Zatem $\det \mathbf{L}(R|R) = rs^{s-r-1}$ i w rezultacie z lematu 2.2 (1) wynika teza. □

Uwagi 2.2.

(1) Lemat 2.1 jest podany w książce Chena jako zadanie do rozwiązania [Che, problem 4.16]; jego historia jest opisana przez Chaikena w pracy [Cha].

(2) Wzór podany we wniosku 2.1 (1) przypomina rozwinięcie wyznacznika macierzy $\mathbf{A}$ wymiaru $s \times s$ w sumę iloczynów permutacji

$$\det \mathbf{A} = \sum_{\sigma} \operatorname{sgn} \sigma \cdot \prod_{i=1}^{s} a_{i\sigma(i)}$$

gdzie σ jest permutacją zbioru $\{1, \ldots, s\}$.

(3) Dowód wniosku 2.4 jest uogólnieniem dowodu "pierwszego wzoru Cayleya" podanego przez Brualdiego i Rysera [BrRy, str. 39]. Wzór ten podaje liczbę drzew rozpinających w grafie nieskierowanym zupełnym.

(4) Łatwo podać dokładny algorytm, który dla ustalonego grafu g oraz zbioru $R \subseteq S$ sprawdza, kosztem $O(s^2)$ działań arytmetycznych, czy g zawiera las o korzeniu R. Stosując taki algorytm do grafu $g(\mathbf{L})$, gdzie $\mathbf{L}$ jest laplasjanem Markowa, możemy na mocy wniosku 2.3 sprawdzić, czy macierz $\mathbf{L}(R|R)$ jest odwracalna. Dla porównania, obliczenie wyznacznika za pomocą metody eliminacji Gaussa wymaga $\frac{1}{3}s^3 + O(s^2)$ operacji i nie zawsze jest dokładne.

2.3. **Rozwinięcia w lasy skierowane dla rozkładu stacjonarnego i macierzy granicznej łańcucha Markowa.**

Rozkładem stacjonarnym ŁM o laplasjanie $\mathbf{L}$ nazywamy nieujemny, unormowany wektor $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \pi_2, \ldots, \pi_s)^T$ spełniający warunek

$$\boldsymbol{\pi}^T \mathbf{L} = \mathbf{0}_s^T. \tag{2.7}$$

Twierdzenie 2.1. (1) *Laplasjan Markowa* $\mathbf{L}$ *jest jednoklasowy wtedy i tylko wtedy, gdy równanie* (2.7) *ma dokładnie jedno rozwiązanie unormowane.*

(2) *Rozkład stacjonarny jednoklasowego ŁM wyraża się wzorami:*

(a) *(Markov chain tree theorem)*

$$\pi_i = \frac{w(i)}{\sum_{j\in S} w(j)} \qquad dla\ i \in S; \tag{2.8}$$

(b) *Mihoc [Io, wzór (4.1)]*

$$\pi_i = \frac{\det \mathbf{L}_{ii}}{\sum_{j\in S} \det \mathbf{L}_{jj}} \qquad dla\ i \in S; \tag{2.9}$$

(c) *Kemeny i Snell [KeSn 1]*

$$\boldsymbol{\pi}^T = \frac{1}{1 - \mathbf{l}_i^T \mathbf{L}_{ii}^{-1} \mathbf{e}_{s-1}} (1, -\mathbf{l}_i^T \mathbf{L}_{ii}^{-1}), \tag{2.10}$$

gdzie $\mathbf{l}_i^T := (l_{i1}, \ldots, \hat{l}_{ii}, \ldots, l_{is})$ *oraz* $w(i) > 0$. [4])

Dowód. I. (i) Udowodnimy najpierw, że wektor $\boldsymbol{\pi}$ zdefiniowany wzorem (2.8) spełnia warunek (2.7). Ze stwierdzenia 2.4 wynika, że $w(i) > 0$ dla pewnego $i \in S$, a zatem $\boldsymbol{\pi}$ jest poprawnie zdefiniowanym rozkładem prawdopodobieństwa na S. Wystarczy teraz pokazać, że dla $i = 1, \ldots, s$

$$\sum_{j=1}^{s} w(j) l_{ji} = 0,$$

czyli

$$\sum_{j\neq i} w(j) l_{ji} = \sum_{k\neq i} w(i) l_{ik}. \tag{2.11}$$

Na mocy definicji $w(j)$, (2.11) jest równoważne układowi

$$\sum_{j\neq i} \sum_{f\in F(j)} w(f) l_{ji} = \sum_{k\neq i} \sum_{f\in F(i)} w(f) l_{ik}. \tag{2.12}$$

Z definicji lasu wynika, że dla dowolnego $f \in F(i)$ oraz $k \neq i$ istnieje dokładnie jedno j takie, że $k \to j$ oraz $(j, i) \in f$. Zatem przekształcenie $\varphi : F(i) \to F(j)$ takie, że $\varphi(f) = f \cup (i, k) \setminus (j, i)$ jest wzajemnie jednoznaczne. Ponadto $w(f) l_{ik} = w(\varphi(f)) l_{ji}$. W rezultacie każdy składnik sumy po lewej stronie (2.12) należy do sumy po prawej stronie (2.12) i odwrotnie. Rysunek 2.1.1 przedstawia pewne drzewo f o korzeniu i w grafie g z rysunku 1.1.1. Rysunek 2.1.2 przedstawia drzewo $\varphi(f)$.
(ii) Udowodnimy teraz, że $\boldsymbol{\pi}$ jest jedynym wektorem unormowanym, spełniającym warunek (2.7).

[4]) "kapelusz" oznaczać będzie pominięcie wyrażenia, nad którym on występuje

Z założenia wynika, że dla dowolnego $A \subset S$ [5]) oraz $i = 1, \ldots, s$ mamy

$$\sum_{j\in A} \pi_j l_{ji} + \sum_{j\notin A} \pi_j l_{ji} = \sum_{j\in A} \pi_i l_{ij} + \sum_{j\notin A} \pi_i l_{ij}.$$

Po zsumowaniu stronami równań dla $i \notin A$ otrzymujemy

$$\sum_{i\notin A} \left(\sum_{j\in A} \pi_j l_{ji} + \sum_{j\notin A} \pi_j l_{ji} \right) = \sum_{i\notin A} \left(\sum_{j\in A} \pi_i l_{ij} + \sum_{j\notin A} \pi_i l_{ij} \right),$$

stąd

$$\sum_{i\notin A} \sum_{j\in A} \pi_j l_{ji} = \sum_{i\notin A} \sum_{j\in A} \pi_i l_{ij}. \tag{2.13}$$

A zatem warunek (2.7) jest równoważny układowi równań (2.13) dla dowolnego $A \subseteq S$.

Załóżmy teraz dla sprzeczności, że istnieją dwa różne wektory unormowane $\boldsymbol{\pi}$, $\boldsymbol{\pi}'$ spełniające (2.13). Z założenia o unormowaniu wynika, że $A_0 := \{i : \ \pi_i > \pi'_i\}$ jest właściwym podzbiorem S. Z (2.13) wynika, że

$$\sum_{i\notin A_0} \sum_{j\in A_0} \pi_i l_{ij} = \sum_{i\notin A_0} \sum_{j\in A_0} \pi_j l_{ji} < \sum_{i\notin A_0} \sum_{j\in A_0} \pi'_j l_{ji} = \sum_{i\notin A_0} \sum_{j\in A_0} \pi'_i l_{ij} \leq \sum_{i\notin A_0} \sum_{j\in A_0} \pi_i l_{ij}.$$

Sprzeczność.

W ten sposób udowodniliśmy część (1) "⇒" oraz wzór (2.8).

(iii) Ze wzoru (2.3) oraz (2.8) wynika (2.9).

(iv) Równanie (2.7) oznacza, że

$$\begin{cases} l_{11}\pi_1 + l_{21}\pi_2 + \ldots + l_{s1}\pi_s = 0 \\ l_{12}\pi_1 + l_{22}\pi_2 + \ldots + l_{s2}\pi_s = 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ l_{1s}\pi_1 + l_{2s}\pi_2 + \ldots + l_{ss}\pi_s = 0. \end{cases} \tag{2.14}$$

Udowodniliśmy, że (2.14) ma dokładnie jedno rozwiązanie unormowane. Załóżmy teraz dla prostoty, że stany są ponumerowane w ten sposób, iż $\pi_1 > 0$. Wtedy poprawne są definicje

$$a_1 := \frac{\pi_1}{\pi_1}, \quad a_2 := \frac{\pi_2}{\pi_1}, \ldots, a_s := \frac{\pi_s}{\pi_1}$$

[5]) Symbole "$\subset$" oraz "$\supset$" oznaczać będą inkluzje właściwe

Z definicji laplasjanu wynika, że pierwsza równość układu (2.14) jest sumą pozostałych równości ze znakiem "$-$". Zatem (2.14) jest równoważny układowi

$$\begin{cases} l_{22}a_2 + l_{32}a_3 + \ldots + l_{s2}a_s = -l_{12} \\ l_{23}a_2 + l_{33}a_3 + \ldots + l_{s3}a_s = -l_{13} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ l_{2s}a_2 + l_{3s}a_3 + \ldots + l_{ss}a_s = -l_{1s}. \end{cases} \tag{2.15}$$

Ze wzoru (2.3) oraz stwierdzenia 2.4 wynika, że

$$\det \mathbf{L}_{11}^T = \det \mathbf{L}_{11} = w(1) > 0,$$

a więc (2.15) ma dokładnie jedno rozwiązanie postaci

$$\begin{bmatrix} a_2 \\ \vdots \\ a_s \end{bmatrix} = -\left(\mathbf{L}_{11}^T\right)^{-1} \begin{bmatrix} l_{12} \\ \vdots \\ l_{1s} \end{bmatrix} \tag{2.16}$$

co po unormowaniu daje (2.10).
(v) Części (i) oraz (ii) dowodu można zastąpić następującym argumentem. Ze wzoru (2.16) oraz wniosku 2.2 otrzymujemy dla $i = 2, \ldots, s$

$$a_i = \frac{w(i)}{w(1)},$$

co po unormowaniu daje (2.8).

II. Załóżmy teraz, że *ŁM* zadany przez laplasjan $\mathbf{L}$ nie jest jednoklasowy, a więc, że ma $m \geq 2$ klas powracających $C_1, \ldots, C_m$. Przedstawmy macierz $\mathbf{L}$ w postaci kanonicznej (2.1). Z udowodnionej części twierdzenia wynika, że dla każdej macierzy $\mathbf{L}_k$ $(k = 1, \ldots, m)$ związanej z krawędziami między stanami należącymi do C_k, istnieje rozkład stacjonarny $\boldsymbol{\pi}_k = (\pi_i^k)_{i \in C_k}$. Zatem każda wypukła kombinacja liniowa wektorów $\bar{\boldsymbol{\pi}}_k = (\bar{\pi}_i^k)_{i \in S}$ takich, że

$$\bar{\pi}_i^k = \begin{cases} \pi_i^k & \text{jeśli } i \in C_k \\ 0 & \text{jeśli } i \notin C_k \end{cases}$$

jest rozkładem stacjonarnym *ŁM* o laplasjanie $\mathbf{L}$. □

Przyjmijmy dla $t \geq 0$, $\mathbf{P}^t = (p_{ij}^t)_{i,j\in S}$, gdzie $p_{ij}^t := \mathbf{Pr}\{X_t = j \big| X_0 = i\}$. *Macierzą graniczną ŁM* z czasem dyskretnym nazywać będziemy macierz $\mathbf{P}^* = (p_{ij}^*)_{i,j\in S}$, której elementy są granicami w sensie Cesaro ciągu $(\mathbf{P}^t)_{t\in\mathbb{N}}$, czyli

$$p_{ij}^* = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \sum_{k=0}^{t-1} p_{ij}^k.$$

Macierzą graniczną ŁM z czasem ciągłym nazywać będziemy macierz $\mathbf{P}^* = (p_{ij}^*)_{i,j\in S}$, taką, że dla $t \in [0, \infty)$

$$p_{ij}^* = \lim_{t\to\infty} p_{ij}^t.$$

Można udowodnić (patrz [Io] wniosek po twierdzeniu 5.1 oraz twierdzenie 8.4 i punkt 8.4.4), że dla dowolnego skończonego *ŁM* o laplasjanie $\mathbf{L}$ zarówno z czasem dyskretnym jak i ciągłym, macierz $\mathbf{P}^*$ istnieje, jest macierzą stochastyczną oraz spełnia równości:

$$\mathbf{L}\mathbf{P}^* = \mathbf{P}^*\mathbf{L} = \mathbf{0}_{s\times s}. \tag{2.17}$$

Twierdzenie 2.2. *Niech dany będzie ŁM o laplasjanie* $\mathbf{L}$ *w postaci kanonicznej*

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_1 & & & \mathbf{0} & \\ & \mathbf{L}_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & \mathbf{0} & & \mathbf{L}_m & \\ \mathbf{Q}_1 & \mathbf{Q}_2 & \dots & \mathbf{Q}_m & \mathbf{Q}_{m+1} \end{bmatrix},$$

gdzie $m \geq 1$ *oraz* $\mathbf{L}_k$ *są nieprzywiedlnymi laplasjanami Markowa dla* $k = 1, \dots, m$. *Niech* C_k *będą klasami zamkniętymi oraz* T *— zbiorem stanów nieistotnych w grafie* $g(\mathbf{L})$. *Niech ponadto* $C := C_1 \dot\cup \dots \dot\cup C_m$. *Wtedy*

$$\mathbf{P}^* = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_1^* & & & \mathbf{0} & \\ & \mathbf{P}_2^* & & & \\ & & \ddots & & \\ & \mathbf{0} & & \mathbf{P}_m^* & \\ \mathbf{Q}_1^* & \mathbf{Q}_2^* & \dots & \mathbf{Q}_m^* & \mathbf{0}_{|T|\times|T|} \end{bmatrix}. \tag{2.18}$$

Ponadto dla $k = 1, \dots, m$

$$\mathbf{P}_k^* = \mathbf{e}_{|C_k|}\boldsymbol{\pi}_k^T \tag{2.19}$$

oraz

$$\mathbf{Q}_k^* = -\mathbf{L}(C\big|C)^{-1}\mathbf{Q}_k\mathbf{P}_k^* = \boldsymbol{\mu}_k\boldsymbol{\pi}_k^T, \tag{2.20}$$

gdzie $\boldsymbol{\pi}_k$ *jest rozkładem stacjonarnym ŁM o laplasjanie* $\mathbf{L}_k$ *oraz* $\boldsymbol{\mu}_k$ *jest rozwiązaniem układu* $\mathbf{L}(C\big|C)\boldsymbol{\mu}_k = -\left(\sum_{j\in C_k} l_{ij}\right)_{i\in T}$.

Dowód. Wzory (2.18) oraz (2.19) mają znane, algebraiczne dowody. Udowodnimy (2.20). Zauważmy, że $\mathbf{L}(C\big|C) = \mathbf{Q}_{m+1}$. Stąd oraz z równości (2.17) i (2.18) wynika, że

$$\mathbf{Q}_k\mathbf{P}_k^* + \mathbf{L}(C\big|C)\mathbf{Q}_k^* = 0 \quad \text{dla } k = 1, \ldots, m.$$

Ponadto z wniosku 2.3 wynika, że $\mathbf{L}(C\big|C)^{-1}$ istnieje. Zachodzi zatem pierwsza równość we wzorze (2.20).

Dla dowodu drugiej równości w (2.20) oznaczmy

$$(c_{ij})_{i,j\in T} := \mathbf{L}(C\big|C)^{-1}.$$

Z udowodnionej części wynika, że macierz $\mathbf{P}_k^*$ ma identyczne wiersze, a zatem elementy macierzy $\mathbf{Q}_k^*$ są postaci

$$q_{ij}^{*k} = \mu_i^k \pi_j^k,$$

gdzie $i \in T$, $j \in C_k$ oraz

$$\mu_i^k := \sum_{n\in C_k}\sum_{l\in T} -c_{il}l_{ln} = -\sum_{l\in T} c_{il}\sum_{n\in C_k} l_{ln}.$$

W zapisie macierzowym mamy

$$-\mathbf{L}(C\big|C)^{-1}\mathbf{Q}_k\mathbf{P}_k^* = \mathbf{L}(C\big|C)^{-1}\mathbf{l}_k\boldsymbol{\pi}_k^T = \boldsymbol{\mu}_k\boldsymbol{\pi}_k^T,$$

gdzie

$$\mathbf{l}_k := \left(-\sum_{j\in C_k} l_{ij}\right)_{i\in T}^T \qquad \text{oraz} \qquad \boldsymbol{\mu}_k := (\mu_i^k)_{i\in T}^T.$$

□

Aby wyrazić elementy macierzy granicznej w postaci rozwinięć w lasy skierowane wygodnie będzie zmodyfikować definicje podane w części 2.1.

Lasem skierowanym o dziedzinie $D \subseteq S$, $D \neq \emptyset$, nazywać będziemy podgraf $f = (D, E_f)$ grafu $g(\mathbf{L})$ bez cykli taki, że z każdego wierzchołka $i \in D$ wychodzi co najwyżej jedna krawędź. Analogicznie do pojęć wprowadzonych w części 2.1,

definiujemy $F(R|D)$ — rodzinę lasów o korzeniu $R \subseteq D$ i o dziedzinie D, $w(f|D)$ — wagę lasu o dziedzinie D oraz $w(R|D) := w(F(R|D))$ — wagę rodziny $F(R|D)$. Jeżeli $R = \{i\}$ dla $i \in S$, to pisać będziemy $F(i|D)$ zamiast $F(\{i\}|D)$ oraz $w(i|D)$ zamiast $w(\{i\}|D)$.

Twierdzenie 2.3. *Niech przestrzeń stanów LM o laplasjanie* $\mathbf{L}$ *składa się z* m *klas powracających* C_k $(k \leq m)$ *oraz zbioru stanów chwilowych* T. *Niech* $C = C_1 \dot{\cup} \ldots \dot{\cup} C_m$. *Wtedy:*

$$p^*_{ij} = \frac{w(j|C_k)}{\sum_{l \in C_k} w(l|C_k)}, \tag{1}$$

jeśli $i, j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$;

$$p^*_{ij} = \frac{\sum_{l \in C_k} w_{il}(C)}{w(C)} \frac{w(j|C_k)}{\sum_{l \in C_k} w(l|C_k)}, \tag{2}$$

jeśli $i \in T$ *oraz* $j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$;

$$p^*_{ij} = 0 \quad \textit{w pozostałych przypadkach.} \tag{3}$$

Dowód. Łatwo teraz zauważyć, że część (1) wynika z twierdzenia 2.1 oraz wzoru (2.19); część (3) wynika ze wzoru (2.18); część (2) jest natomiast konsekwencją drugiej równości we wzorze (2.20), lematu 2.3, udowodnionej części (1) oraz równości

$$\begin{aligned} p^*_{ij} &= \frac{\sum_{l \in C_k} \sum_{n \in T} w_{in}(C, n) p_{nl}}{w(C)} \frac{w(j|C_k)}{\sum_{l \in C_k} w(l|C_k)} \\ &= \frac{\sum_{l \in C_k} w_{il}(C)}{w(C)} \frac{w(j|C_k)}{\sum_{l \in C_k} w(l|C_k)}. \end{aligned}$$

□

Uwagi 2.3.

(1) Historia odkrycia twierdzenia 2.1 (a) pozostaje zagadkowa. Aldous [Al 3] pisze, że jest to "najczęściej reodkrywane twierdzenie w teorii prawdopodobieństwa". Kohler i Vollmerhaus [KoVo] nazywają je metodą wykresu (diagram method) i przypisują Hillowi [Hi].

Twierdzenie 2.1 (a) odkryli niezależnie Freidlin i Wentzell [FreWe 1], analizując miary stacjonarne zaburzonych procesów dyfuzji, oraz Shubert [Sh].

Podana przez nas część I (i) dowodu twierdzenia 2.1 pochodzi z pracy [FreWe 2]. Równania (2.13) udowodnił wcześniej Korniejew [Kor].

(2) Przedstawione tutaj dowody wzorów Mihoca (2.9), wzoru (2.10) oraz twierdzenia 2.2 są inne od dowodów znanych z literatury, ponieważ nie korzystaliśmy w nich z twierdzenia Perrona–Frobeniusa, lematu von Neumanna, redukcji do przypadku łańcucha pochłaniającego czy teorii uogólnionej odwrotności (patrz np. [KeSn 1–2], [Mey], [IsMa], [Se], [Io], [Pu]). Wykorzystanie rozwinięcia w lasy skierowane dla laplasjanu (2.2) pozwoliło uniknąć argumentów analitycznych.

(3) Leighton i Rivest [LeRi 1–2] uogólnili twierdzenie 2.1 (2) (a) na dowolne skończone *ŁM* (twierdzenie 2.2) i nazwali je: "Markov chain tree theorem". Anantharam i Tsousac [AnTs] podali probabilistyczny dowód tego twierdzenia. Podane przez nas sformułowanie twierdzenia 2.2 różni się od poprzednich.

Dla dowolnego laplasjanu Markowa $\mathbf{L}$ i związanego z nim grafu $g(\mathbf{L})$, niech F oznacza zbiór lasów o największej liczbie krawędzi, F_j — podzbiór F złożony z lasów o korzeniach zawierających j, natomiast F_{ij} — podzbiór F_j złożony z lasów zawierających drogę z i do j. Anantharam i Tsousac [AnTs] udowodnili, że

$$p^*_{ij} = \frac{w(F_{ij})}{w(F)}$$

oraz dla macierzy nieprzywiedlnych

$$p^*_{ij} = \frac{w(F_j)}{w(F)}.$$

Podane przez nas w twierdzeniu 2.2 rozwinięcia w lasy skierowane obejmują również przypadek czasu ciągłego, a ponadto są bardziej podstawowe — dają rozwinięcia Anantharama i Tsousaca po pomnożeniu licznika i mianownika przez stałą. Istotnie:

$$w(F) = w(C) \sum_{i_1 \in C_1, \dots, i_m \in C_m} w(i_1 \big| C_1) \cdots w(i_m \big| C_m),$$

$$w(F_j) = w(C)w(j\big|C_k) \sum_{i_1\in C_1,\dots,\widehat{i_k\in C_k},\dots,i_m\in C_m} w(i_1\big|C_1)\cdots\widehat{w(i_k\big|C_k)}\cdots w(i_m\big|C_m),$$

jeśli $j \in C_k$,

$$w(F_{ij}) =$$

$$= \sum_{l\in C_k} w_{il}(C_k)w(j\big|C_k) \sum_{i_1\in C_1,\dots,\widehat{i_k\in C_k},\dots,i_m\in C_m} w(i_1\big|C_1)\cdots\widehat{w(i_k\big|C_k)}\cdots w(i_m\big|C_m),$$

jeśli $j \in C_k$.

2.4. **Rozwinięcia w lasy skierowane dla innych charakterystyk łańcuchów Markowa.**

Podamy teraz rozwinięcia w lasy skierowane dla innych charakterystyk łańcucha Markowa. Przyjmijmy dla ustalonego $R \subseteq S$ oraz dla dowolnych $\omega \in \Omega$, $A \in \mathcal{F}$, $i, j \notin R$, $k \in R$:

$\tau_R(\omega) := \inf\{t \geq 0 : X_t(\omega) \in R\}$ — *czas dojścia do zbioru* R,
$\mathbf{Pr}_i(A) := \mathbf{Pr}(A\big|X_0 = i)$,
$\mathbf{E}_i Y := \int_\Omega Y(\omega)\mathbf{Pr}_i(d\omega)$ *dla dowolnej funkcji mierzalnej* $Y : \Omega \to \mathbb{R}$,
$\mu_{ij}(R) = \mathbf{E}_i\left[\sum_{0\leq t<\tau_R} \mathbf{1}(X_t = j)\right]$ — *średnia liczba pojawienia się stanu* j *przed pochłonięciem*, [6])
$m_i(R) := \mathbf{E}_i\tau_R$ — *średni czas dojścia do zbioru* R,
$m_i^{(2)}(R) := \mathbf{E}_i\tau_R^2$ — *drugi moment czasu dojścia do zbioru* R,
$\sigma_i^2(R) := \mathbf{E}_i(\tau_R - m_i(R))^2$ — *wariancja czasu dojścia do zbioru* R,
$p_{ik}(R) := \mathbf{Pr}_i\{X_{\tau_R(\omega)}(\omega) = k\}$ — *rozkład prawdopodobieństwa w chwili dojścia do zbioru* R.

[6]) Niech p będzie zdaniem logicznym. Wtedy

$$\mathbf{1}(p) := \begin{cases} 1 & \text{gdy } p \text{ jest prawdziwe} \\ 0 & \text{gdy } p \text{ jest fałszywe.} \end{cases}$$

Twierdzenie 2.4. *Niech dany będzie taki laplasjan Markowa* $\mathbf{L}$*, że w indukowanym przez niego grafie* $g(\mathbf{L})$ *istnieje las o korzeniu* R*. Wtedy dla* $i, j \in S \setminus R$*,* $k \in R$*:*

$$\mu_{ij}(R) = \frac{w_{ij}(R, j)}{w(R)}; \tag{1}$$

$$p_{ik}(R) = \frac{w_{ik}(R)}{w(R)}; \tag{2}$$

$$m_i(R) = \frac{\sum_{j \notin R} w_{ij}(R, j)}{w(R)}; \tag{3}$$

(4) *dla ŁM z czasem dyskretnym*

$$\sigma_i^2(R) = \frac{\sum_{j \notin R} w_{ij}(R, j) \left[\sum_{k \notin R} w_{jk}(R, k)(2 + l_{kR}) - \sum_{l \notin R} w_{il}(R, l)\right]}{w^2(R)},$$

gdzie $l_{kR} := \sum_{l \in R} l_{kl}$;

(4′) *dla ŁM z czasem ciągłym*

$$\sigma_i^2(R) = \frac{\sum_{j \notin R} w_{ij}(R, j) \left[2 \sum_{k \notin R} w_{jk}(R, k) - \sum_{l \notin R} w_{il}(R, l)\right]}{w^2(R)}.$$

Dowód. Z wniosku 2.3 wynika, że macierz $\mathbf{L}(R|R)$ jest odwracalna.
(1) Równość wynika z lematu 2.3 oraz równości w punkcie 3.1.1 [Io].

(2) Oznaczmy dla $i, j \notin R$ oraz $k \in R$

$$F(R|i \to \ldots \to j \to k) := \{f \in F_{ik}(R) : \ i \text{ “wchodzi” do } R \text{ w punkcie } k \text{ przez } j\}.$$

Zauważmy, że $F_{ik}(R) = \dot{\bigcup}_{j \notin R} F(R|i \to \cdots \to j \to k)$ oraz $w[F(R|i \to \ldots \to j \to k)] = -w_{ij}(R, j) l_{jk}$. Stąd dla $i \notin R$, $k \in R$

$$w_{ik}(R) = -\sum_{j \notin R} w_{ij}(R, j) l_{jk}. \tag{2.21}$$

Z dowodu twierdzenia 3.3 oraz punktu 8.5.6 [Io] wynika, że

$$\mathbf{L}(R|R)(p_{ik}(R))_{i \in R,\, k \in R} = -\mathbf{L}(R|S \setminus R).$$

Zatem z założenia, lematu 2.3 oraz (2.21) otrzymujemy kolejno równości

$$\begin{aligned}\big(p_{ik}(R)\big)_{i\notin R,\,k\in R} &= -\mathbf{L}(R\big|R)^{-1}\cdot\mathbf{L}(R\big|S\setminus R)\\ &= \left(\frac{-\sum_{j\notin R} w_{ij}(R,j)l_{jk}}{w(R)}\right)_{i\notin R,\,k\in R} = \left(\frac{w_{ik}(R)}{w(R)}\right)_{i\notin R,\,k\in R}.\end{aligned}$$

(3) Oznaczmy $r := |R|$. Wektor $\mathbf{m}(R) := \big(m_1(R),\dots m_{s-r}(R)\big)^T$ spełnia, na mocy twierdzenia 3.2 oraz stwierdzenia 8.6 [Io], równanie

$$\mathbf{L}(R\big|R)\mathbf{m}(R) = \mathbf{e}_{s-r}. \tag{2.22}$$

Z lematu 2.3 otrzymujemy tezę.

(4) Oznaczmy dla $j,k\notin R$ oraz $l\in R$

$$F(R\big|j\to\ldots\to k\to l) := \{f\in F(R):\ j \text{ “wchodzi” do } R \text{ w punkcie } l \text{ przez } k\}.$$

Zauważmy, że $F(R) = \dot{\bigcup}_{k\notin R,\,l\in R} F(R\big|j\to\cdots\to k\to l)$ oraz $w[F(R\big|j\to\ldots\to k\to l)] = -w[F_{jk}(R\cup\{k\})]l_{kl}$. Stąd

$$w[F(R)] = -\sum_{k\notin R} w[F_{jk}(R\cup\{k\})]l_{kR} \quad \text{gdzie } l_{kR} = \sum_{l\in R} l_{kl}. \tag{2.23}$$

Z twierdzenia 3.2 [Io] wynika, że wektor $\mathbf{m}^{(2)}(R) = \Big(m_1^{(2)}(R),\dots m_{s-r}^{(2)}(R)\Big)^T$ spełnia równanie

$$\mathbf{L}(R\big|R)\mathbf{m}^{(2)}(R) = 2\mathbf{m}(R) - \mathbf{e}_{s-r}.$$

Stąd, lematu 2.3, udowodnionej części twierdzenia dla $\mathbf{m}(R)$ oraz (2.23) otrzymujemy kolejno

$$\begin{aligned}m_i^{(2)}(R) &= \frac{2\sum_{j\notin R} w_{ij}(R,j)m_j(R)}{w(R)} - m_i(R)\\ &= \frac{\sum_{j\notin R} w_{ij}(R,j)[2\sum_{k\notin R} w_{jk}(R,k) - w(R)]}{w^2(R)}\\ &= \frac{\sum_{j\notin R} w_{ij}(R,j)\left[\sum_{k\notin R} w_{jk}(R,k)(2+l_{kR})\right]}{w^2(R)}.\end{aligned}$$

Stąd wynika wzór dla wariancji τ_R, ponieważ

$$\sigma_i^2(R) = m_i^{(2)}(R) - m_i^2(R).$$

(4') Ze stwierdzenia 8.6 [Io] wynika, że dla procesu Markowa z czasem ciągłym

$$m_i^{(2)}(R) = \frac{2\sum_{j\notin R,\, k\notin R} w_{ij}(R,j)w_{jk}(R,k)}{w^2(R)}.$$

Stąd wynika teza. □

Uwagi 2.4.

(1) Z twierdzenia 2.4 (2) wynika, że wzór (2) w twierdzeniu 2.3 można zapisać w postaci

$$p_{ij}^* = \pi_j^k \sum_{l\in C_k} p_{il}(C),$$

gdzie π_j^k jest elementem rozkładu stacjonarnego $\boldsymbol{\pi}_k$ związanego z laplasjanem $\mathbf{L}_k$, $i \in T$ oraz $j \in C_k$ dla pewnego $k \le m$.

(2) Twierdzenie 2.4 (2) i (3) udowodnili dla łańcuchów Markowa z czasem dyskretnym Freidlin i Wentzell [FreWen 1–2].

(3) W dowodzie twierdzenia 2.4 (4) wykorzystałem rozwinięcia dla $\mathbf{m}^{(2)}$, w których występuje odejmowanie. W podobny sposób można otrzymać rozwinięcia bez odejmowania. Wystarczy skorzystać ze wzoru, podanego przez Heymana i Reeves [HeRe]:

$$\begin{cases} \mathbf{L}(R\big|R)\mathbf{h} = \mathbf{e}_{s-r} + \mathbf{P}(R\big|R)\mathbf{e}_{s-r} \\ \mathbf{L}(R\big|r)\mathbf{m}^{(2)} = \mathbf{h}. \end{cases}$$

W rozwinięciach otrzymanych w ten sposób będą jednak występowały elementy diagonalne macierzy przejścia.

(4) W twierdzeniach 2.1, 2.3 i 2.4 podałem rozwinięcia w lasy skierowane tylko dla najbardziej znanych charakterystyk *ŁM*. W podobny sposób można "rozwijać" inne charakterystyki. Np. rozwinięcia dla wyższych momentów średniego czasu dojścia do zbioru R,

$$\mathbf{m}^{(k)}(R) := \left(m_i^{(k)}(R)\right)_{i\in S\setminus R}, \quad \text{gdzie}$$
$$m_i^{(k)}(R) := \mathbf{E}_i\tau_R^k \quad \text{dla } k = 3,4,\ldots$$

można otrzymać z twierdzenia 3.2 i stwierdzenia 8.6 [Io].

Z kolei możliwość rozwinięcia w lasy skierowane elementów macierzy fundamentalnej $\mathbf{Z} := (\mathbf{P}^*+\mathbf{L})^{-1}$ nieprzywiedlnego *ŁM* o laplasjanie $\mathbf{L}$ i macierzy

granicznej $\mathbf{P}^*$, wynika ze wzoru podanego przez Kemeny'ego i Snella [KeSn 1], [Io, punkt 4.3.4]:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{P}^* + (\mathbf{I} - \mathbf{P}^*) \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{0}_{s-1}^T \\ \mathbf{0}_{s-1} & \mathbf{L}_{11}^{-1} \end{pmatrix} (\mathbf{I} - \mathbf{P}^*).$$

2.5. **Rozwinięcia w lasy skierowane a wartości własne laplasjanu Markowa.**

Rozwinięcia w lasy skierowane umożliwiają lokalizację wartości własnych laplasjanu Markowa, a więc również macierzy przejścia lub generatora. Oszacowania podane w twierdzeniu 2.6 wykorzystamy w rozdziale 5. do porównania szybkości zbieżności do rozkładu stacjonarnego dla algorytmu Metropolisa i próbnika Gibbsa.

Niech $\varphi_{\mathbf{L}}(x) := \det(x\mathbf{I} - \mathbf{L}) = a_s x^s + a_{s-1}x^{s-1} + \ldots + a_1 x + a_0$ będzie wielomianem charakterystycznym lasplasjanu Markowa $\mathbf{L}$. Łatwo zauważyć, że $a_0 = 0$ i $a_s = 1$. Niech $0 = \lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_s$ będą pierwiastkami $\varphi_{\mathbf{L}}$, czyli wartościami własnymi $\mathbf{L}$. Niech ponadto

$$F^k := \bigcup_{\substack{R \subseteq S \\ |R| = k}} F(R) \quad \text{dla } k = 0, \ldots, s.$$

Zauważmy, że $w(F^0) = 0$ oraz $w(F^s) = 1$.

Następujące twierdzenie uzupełnia stwierdzenie 2.5.

Twierdzenie 2.5. *Skończony ŁM ma dokładnie m klas powracających wtedy i tylko wtedy, gdy zero jest m-krotnym pierwiastkiem $\varphi_{\mathbf{L}}$.*

Dowód. Z lematu 2.2 (1), wzoru 1.2.11 [HoJo — dowód indukcyjny przez rozwinięcie Laplace'a dla wyznacznika] oraz wzorów Viete'a otrzymujemy kolejno równości dla $k = 0, 1, \ldots, s-1$

$$w(F^k) = \sum_{\substack{R \subseteq S \\ |R| = k}} \det \mathbf{L}(R\big|R) = (-1)^{s-k} a_k = \sum_{1 \le i_1 < \ldots < i_{s-k} \le s} \lambda_{i_1} \ldots \lambda_{i_{s-k}}. \tag{2.24}$$

Zauważmy teraz, że na mocy stwierdzenia 2.5 prawa strona tezy jest równoważna warunkowi

$$w(F^0) = 0, \ldots, w(F^{m-1}) = 0 \quad \text{oraz} \quad w(F^m) > 0. \tag{2.25}$$

Jeśli $\lambda_1 = \ldots = \lambda_m = 0$, to z równości (2.24) wynika, że warunek powyższy jest spełniony.

W celu udowodnienia implikacji przeciwnej zauważmy, że jeśli $0 = w(F^0) = \lambda_1 \ldots \lambda_s$, to istnieje $i_1 \in S$ takie, że $\lambda_{i_1} = 0$. Wtedy z (2.24) otrzymujemy $0 = w(F^1) = \lambda_1 \ldots \hat{\lambda}_{i_1} \ldots \lambda_s$. Zatem istnieje $i_2 \in S$, $i_2 \neq i_1$ takie, że $\lambda_{i_2} = 0$. W ten sposób dowodzimy indukcyjnie, że istnieją parami różne indeksy $i_1, \ldots, i_m \in S$ takie, że $\lambda_{i_1} = \ldots = \lambda_{i_k} = 0$ oraz dla $k = 0, \ldots, m-1$

$$w(F^k) = \prod_{\substack{j \neq i_l \\ l \leq k}} \lambda_j.$$

Ponadto z (2.25) wynika, że

$$0 < w(F^m) = \prod_{\substack{j \neq i_k \\ k \leq m}} \lambda_j.$$

Zatem pozostałych $s - m$ wartości własnych laplasjanu $\mathbf{L}$ jest różnych od zera. □

Wniosek 2.5. *Jeśli skończony ŁM zadany przez laplasjan* $\mathbf{L}$ *jest jednoklasowy, to dla dowolnego* $k > 1$, $\operatorname{re} \lambda_k(\mathbf{L}) > 0$, *w przeciwnym przypadku istnieje* $k > 0$, *takie że* $\lambda_k(\mathbf{L}) = 0$.

Dowód. Oczywiście można założyć, że laplasjan $\mathbf{L}$ jest niezerowy, czyli $d := \max_{i \in S} \left(-\sum_{j \neq i} l_{ij} \right) > 0$. Wartości własne $\mathbf{L}$ (λ_i, $i \in S$) oraz wartości własne macierzy $\mathbf{A} := \mathbf{I} - d^{-1}\mathbf{L}$, ($\alpha_i$, $i \in S$), są związane równością $\lambda_i = d(1 - \alpha_i)$, ponieważ $-d(\alpha\mathbf{I} - \mathbf{A}) = d(1-\alpha)\mathbf{I} - \mathbf{L}$ dla dowolnego $\alpha \in \mathbb{C}$.

Łatwo zauważyć, że $\mathbf{A}$ jest macierzą substochastyczną oraz $|\alpha_i| \leq 1$ [Io p. 1.11.2]. Zatem

$$\left(1 - \frac{1}{d} \operatorname{re} \lambda_i\right)^2 + \left(\frac{1}{d} \operatorname{im} \lambda_i\right)^2 \leq 1,$$

czyli

$$0 \leq |\lambda_i|^2 \leq 2d \operatorname{re} \lambda_i.$$

W rezultacie z twierdzenia 2.5 wynika teza. □

Załóżmy teraz, że wszystkie wartości własne laplasjanu Markowa $\mathbf{L}$ są rzeczywiste (założenie to jest spełnione m.in. dla interesujących i omawianych w rozdziale 5. łańcuchów odwracalnych) i uporządkowane według wzrostu wartości $\lambda_1 = 0 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_s$. Przy pomocy rozwinięć w lasy skierowane można w tym przypadku oszacować wartości własne $\mathbf{L}$.

Twierdzenie 2.6. *Niech* $\mathbf{L}$ *będzie jednoklasowym laplasjanem Markowa o rzeczywistych wartościach własnych. Wtedy dla* $k = 2, \ldots, s$

$$\max\left\{ \tbinom{s-1}{k-2}^{-1} \frac{w(F^{k-1})}{w(F^k)},\ \tbinom{s-1}{k-2} \frac{w(F^1)}{w(F^k)w(F^{s-k+2})} \right\} \leq \lambda_k$$

oraz

$$\lambda_k \leq \min\left\{ \tbinom{s-1}{k-1} \frac{w(F^{k-1})}{w(F^k)},\ \tbinom{s-1}{k-1}^{-1} \frac{w(F^{s-k+1})w(F^{k-1})}{w(F^1)} \right\}.$$

Dowód. Dla $k = s$ tezę otrzymujemy bezpośrednio z równości (2.24) oraz konwencji $w(F^s) = 1$. Z równości (2.24) wynika ponadto, że dla $k = 2, \ldots, s-1$

$$\frac{w(F^k)}{w(F^1)} = \sum_{2 \leq i_1 < \ldots < i_{k-1} \leq s} \frac{1}{\lambda_{i_1} \ldots \lambda_{i_{k-1}}}.$$

Zatem dla $k = 2, \ldots, s-1$

$$\frac{1}{\lambda_2 \ldots \lambda_k} \leq \frac{w(F^k)}{w(F^1)} \leq \tbinom{s-1}{k-1} \frac{1}{\lambda_2 \ldots \lambda_k}$$

oraz dla $k = 2, \ldots, s$

$$\tbinom{s-1}{k-1} \lambda_2 \ldots \lambda_k \leq w(F^{s-k+1}).$$

W rezultacie dla $k = 2, \ldots, s-1$

$$\begin{aligned}
&\frac{w(F^1)}{w(F^k)} \max\left\{ \tbinom{s-1}{k-2}^{-1} \frac{w(F^{k-1})}{w(F^1)},\ \tbinom{s-1}{k-2} \frac{1}{w(F^{s-k+2})} \right\} \\
&\leq \frac{w(F^1)}{w(F^k)} \frac{1}{\lambda_2 \ldots \lambda_{k-1}} \leq \lambda_k \\
&\leq \min\left\{ \tbinom{s-1}{k-1} \frac{w(F^1)}{w(F^k)},\ \tbinom{s-1}{k-1}^{-1} w(F^{s-k+1}) \right\} \frac{1}{\lambda_2 \ldots \lambda_{k-1}} \\
&\leq \min\left\{ \tbinom{s-1}{k-1} \frac{w(F^1)}{w(F^k)},\ \tbinom{s-1}{k-1}^{-1} w(F^{s-k+1}) \right\} \frac{w(F^{k-1})}{w(F^1)}.
\end{aligned}$$

□

Niech teraz $\bar{\mathbf{L}} := sa\mathbf{I} - a\mathbf{J}_s - \mathbf{L}$, gdzie $a := -\min_{i\neq j} l_{ij}$. Łatwo zauważyć, że $\bar{\mathbf{L}}$ jest laplasjanem Markowa. Niech ponadto $\bar{\lambda}_1, \ldots, \bar{\lambda}_s$ będą wartościami własnymi $\bar{\mathbf{L}}$ oraz dla $k = 0, \ldots, s$, niech $\bar{F}^k$ oznaczają rodziny lasów o korzeniach k elementowych w grafie $g(\bar{\mathbf{L}})$.

Okazuje się, że oszacowania wartości własnych laplasjanu $\bar{\mathbf{L}}$ uzupełniają oszacowania wartości własnych $\mathbf{L}$ podane w twierdzeniu 2.6.

Twierdzenie 2.7. *Niech* $\mathbf{L}$ *będzie jednoklasowym laplasjanem Markowa o rzeczywistych wartościach własnych. Wtedy dla* $k = 2, \ldots, s$

$$sa - \min\left\{ \tbinom{s-1}{k-2} \frac{w(\bar{F}^{s-k+1})}{w(\bar{F}^{s-k+2})},\ \tbinom{s-1}{k-2}^{-1} \frac{w(\bar{F}^{k-1})w(\bar{F}^{s-k+1})}{w(\bar{F}^1)} \right\} \leq \lambda_k$$

oraz

$$\lambda_k \leq sa - \max\left\{ \tbinom{s-1}{k-1}^{-1} \frac{w(\bar{F}^{s-k+1})}{w(\bar{F}^{s-k+2})},\ \tbinom{s-1}{k-1} \frac{w(\bar{F}^1)}{w(\bar{F}^{s-k+2})w(\bar{F}^k)} \right\}.$$

Dowód. Oszacowania powyższe są konsekwencją twierdzenia 2.6 zastosowanego do laplasjanu $\bar{\mathbf{L}}$ oraz równości $\bar{\lambda}_{i+1} = sa - \lambda_{s-i+1}$ dla $i = 1, \ldots, s-1$, które są konsekwencją lematu 2.4 poniżej. □

Lemat 2.4.

$$(sa - x)\varphi_{\bar{\mathbf{L}}}(x) = (-1)^{s+1} x \varphi_{\mathbf{L}}(sa - x).$$

Dowód. Oznaczmy przez $\mathbf{I}'$, $\mathbf{J}'$, $\mathbf{L}'$ macierze rzędu $s \times (s-1)$ powstałe z $\mathbf{I}$, $\mathbf{J}$, $\mathbf{L}$ przez usunięcie pierwszej kolumny. Wtedy

$$\begin{aligned}
(sa - x)\det(x\mathbf{I} - \bar{\mathbf{L}}) &= (sa - x)\det(x\mathbf{I} - sa\mathbf{I} + a\mathbf{J} + \mathbf{L}) \\
&= (-1)^s (sa - x)\det[(sa - x)\mathbf{I} - a\mathbf{J} - \mathbf{L}] \\
\left\{ \begin{array}{l} \text{dodanie do pierwszej kolumny} \\ \text{sumy pozostałych kolumn} \end{array} \right\} &= (-1)^s (sa - x)\det \begin{bmatrix} -x & (sa - x)\mathbf{I}_1 \\ \vdots & -a\mathbf{J}_1 - \mathbf{L}_1 \\ -x & \end{bmatrix} \\
\left\{ \begin{array}{l} \text{pomnożenie pierwszej kolumny} \\ \text{przez } -\frac{a}{x} \end{array} \right\} &= (-1)^{s+1} \frac{x}{a}(sa - x)\det \begin{bmatrix} a & (sa - x)\mathbf{I}_1 \\ \vdots & -a\mathbf{J}_1 - \mathbf{L}_1 \\ a & \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

$$\left\{\begin{array}{l}\text{dodanie pierwszej kolumny}\\ \text{do pozostałych kolumn}\end{array}\right\} = (-1)^{s+1}\frac{x}{a}(sa-x)\det\begin{bmatrix} a & (sa-x)\mathbf{I}_1 \\ \vdots & -\mathbf{L}_1 \\ a & \end{bmatrix}$$

$$\left\{\begin{array}{l}\text{od prawej do lewej:}\\ \text{dodanie do pierwszej kolumny}\\ \text{sumy pozostałych kolumn}\\ \text{i pomnożenie pierwszej kolumny}\\ \text{przez } \frac{a}{sa-x}\end{array}\right\} = (-1)^{s+1}x\det[(sa-x)\mathbf{I}-\mathbf{L}].$$

□

Uwagi 2.5.

(1) Twierdzenie 2.5 i wniosek 2.5 są znane (patrz np. [Io], [Se]) — w podanych dowodach nie wykorzystałem jednak argumentów analitycznych.

(2) Lemat 2.4 jest uogólnieniem twierdzenia 3.6 z pracy [Mo], gdzie porównywano wartości własne symetrycznego laplasjanu Markowa $\mathbf{L} = (l_{ij})_{i,j\in S}$ i laplasjanu $\bar{\mathbf{L}} = (\bar{l}_{ij})_{i,j\in S}$, takiego że $\bar{l}_{ij} := 1 - l_{ij}$. Warto zauważyć, że stała a z twierdzenia 2.7 daje najlepsze oszacowania wśród liczb b, dla których laplasjan

$$\mathbf{L}(b) := sb\mathbf{I}_s - b\mathbf{J}_s - \mathbf{L}$$

jest laplasjanem Markowa.

3. Algorytmy dla układów równań liniowych związanych z łańcuchami Markowa.

3.1. **Względnie zaburzone łańcuchy Markowa.**

Podane w rozdziale 2. rozwinięcia w lasy skierowane dla różnych charakterystyk *ŁM* można wykorzystać do oszacowania błędu algorytmów, które rozwiązują układy równań liniowych spełnione przez te charakterystyki. Poniższe twierdzenia i wnioski określają wpływ zaburzeń laplasjanu Markowa na zaburzenia charakterystyk *ŁM*.

Twierdzenie 3.1. *Niech* $\mathbf{L}$ *będzie laplasjanem Markowa,* $R \subseteq S$, $u := s - |R|$ *oraz niech* $\mathbf{b} = (b_k)_{k \in S \setminus R}$ *nieujemnym wektorem u-wyrazowym. Niech* $\tilde{\mathbf{L}} = (\tilde{l}_{ij})_{i,j \in S}$ *oraz* $\tilde{\mathbf{b}} = (\tilde{b})_{i \in S \setminus R}$ *będą odpowiednio laplasjanem i wektorem, których elementy spełniają następujące nierówności:*

$$C_L l_{ij} \geq \tilde{l}_{ij} \geq C_U l_{ij},$$
$$c_L b_i \leq \tilde{b}_i \leq c_U b_i.$$

dla $i \in S \setminus R$, $j \in S$, $i \neq j$, *oraz* $0 < C_L \leq 1 \leq C_U$, $0 < c_L \leq 1 \leq c_U$. *Załóżmy, że w grafie* $g(\mathbf{L})$ *istnieje las o korzeniu* R. *Wtedy:*

(1) *macierze* $\mathbf{L}(R|R)$ *oraz* $\tilde{\mathbf{L}}(R|R)$ *są odwracalne;*

(2) *rozwiązania* $\mathbf{x} = (x_i)_{i \in S \setminus R}$ *oraz* $\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}_i)_{i \in S \setminus R}$ *układów równań liniowych*

$$\mathbf{L}(R|R)\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad oraz \quad \tilde{\mathbf{L}}(R|R)\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}}$$

spełniają nierówności

$$\left(\frac{C_L^{u-1} c_L}{C_U^u}\right) x_i \leq \tilde{x}_i \leq \left(\frac{C_U^{u-1} c_U}{C_L^u}\right) x_i \quad dla\ i \in S \setminus R.$$

(3) *rozwiązania* $\mathbf{x} = (x_i)_{i \in S \setminus R}$ *oraz* $\tilde{\mathbf{x}} = (\tilde{x}_i)_{i \in S \setminus R}$ *układów równań liniowych*

$$\mathbf{L}^T(R|R)\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad oraz \quad \tilde{\mathbf{L}}^T(R|R)\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}}$$

spełniają nierówności

$$\left(\frac{C_L^{u-1} c_L}{C_U^u}\right) x_i \leq \tilde{x}_i \leq \left(\frac{C_U^{u-1} c_U}{C_L^u}\right) x_i \quad dla\ i \in S \setminus R.$$

Dowód. Zauważmy, że $g(\mathbf{L}) = g(\tilde{\mathbf{L}})$. Zatem część (1) wynika z wniosku 2.3. Niech $w(f)$ oraz $\tilde{w}(f)$ będą wagami lasu f w grafach obciążonych $(\mathbf{L}, g(\mathbf{L}))$ oraz $(\tilde{\mathbf{L}}, g(\tilde{\mathbf{L}}))$. Z założenia wynika, że dla dowolnych $i, j \in S \setminus R$,

$$f_1 \in F(R) \quad \text{oraz} \quad f_2 \in F_{ij}(R, j) \quad \text{w grafie } g(\mathbf{L}),$$

spełnione są nierówności:

$$0 < (C_L)^u w(f_1) \leq \tilde{w}(f_1) \leq (C_U)^u w(f_1), \tag{3.1}$$

$$0 < (C_L)^{u-1} w(f_2) \leq \tilde{w}(f_2) \leq (C_U)^{u-1} w(f_2). \tag{3.2}$$

Stąd oraz z lematu 2.3 otrzymujemy dla $i \in S \setminus R$

$$\begin{aligned} \tilde{x}_i &= \frac{\sum_{j \in S \setminus R} \tilde{w}_{ij}(R, j) \tilde{b}_j}{\tilde{w}(R)} \\ &\leq \frac{\sum_{j \in S \setminus R} C_U^{u-1} w_{ij}(R, j) c_U b_j}{C_L^u w(R)} \\ &= \frac{C_U^{u-1} c_U}{C_L^u} x_i. \end{aligned}$$

Podobnie dowodzimy, że

$$\tilde{x}_i \geq \frac{C_L^{u-1} c_L}{C_U^u} x_i.$$

W ten sposób otrzymujemy część (2) twierdzenia. Część (3) dowodzimy podobnie. □

Twierdzenie 3.2. *Niech $\mathbf{L} = (l_{ij})_{i,j \in S}$ będzie nieprzywiedlnym laplasjanem Markowa oraz $\tilde{\mathbf{L}} = (\tilde{l}_{ij})_{i,j \in S}$ laplasjanem, którego elementy spełniają następujące nierówności:*

$$C_L l_{ij} \geq \tilde{l}_{ij} \geq C_U l_{ij} \quad \textit{dla } i \neq j$$

oraz

$$0 < C_L \leq 1 \leq C_U.$$

Wtedy rozkłady stacjonarne dla $\mathbf{L}$ oraz $\tilde{\mathbf{L}}$ spełniają nierówności

$$\left(\frac{C_L}{C_U}\right)^{s-1} \pi_i \leq \tilde{\pi}_i \leq \left(\frac{C_U}{C_L}\right)^{s-1} \pi_i$$

oraz

$$\left(\frac{C_L}{C_U}\right)^{s-1}\frac{\pi_i}{\pi_j} \leq \frac{\tilde{\pi}_i}{\tilde{\pi}_j} \leq \left(\frac{C_U}{C_L}\right)^{s-1}\frac{\pi_i}{\pi_j} \quad dla\ i,j \in S.$$

Dowód. Twierdzenie to dowodzimy podobnie do twierdzenia 3.1 wykorzystując wzór (2.8). Możemy również udowodnić je jako wniosek z twierdzenia 3.1 wykorzystując wzór (2.10). □

Twierdzenie 3.3. *Niech dany będzie ŁM o laplasjanie* $\mathbf{L}$*, którego zbiór stanów składa się z* m *klas powracających* C_k $(k \leq m)$ *oraz zbioru stanów chwilowych* T*. Niech* $C := C_1 \dot{\cup} \ldots \dot{\cup} C_m$*,* $c := |C|$*,* $t := |T|$ *oraz* $c_k := |C_k|$ *dla* $k = 1, \ldots, m$*. Niech ponadto* $\tilde{\mathbf{L}} = (\tilde{l}_{ij})_{i,j\in S}$ *będzie laplasjanem, którego elementy spełniają następujące nierówności*

$$C_L l_{ij} \geq \tilde{l}_{ij} \geq C_U l_{ij} \quad dla\ i \neq j$$

oraz

$$0 < C_L \leq 1 \leq C_U.$$

Wtedy:

$$\left(\frac{C_L}{C_U}\right)^{c_k-1} p^*_{ij} \leq \tilde{p}^*_{ij} \leq \left(\frac{C_U}{C_L}\right)^{c_k-1} p^*_{ij} \tag{1}$$

jeśli $i,j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$*;*

$$\frac{C_L^{c_k+t-1}}{C_U^{c+c_k-1}} p^*_{ij} \leq \tilde{p}^*_{ij} \leq \frac{C_U^{c_k+t-1}}{C_L^{c+c_k-1}} p^*_{ij} \tag{2}$$

jeśli $i \in T$ *oraz* $j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$*;*

$$\tilde{p}^*_{ij} = p^*_{ij} = 0 \qquad w\ pozostałych\ przypadkach. \tag{3}$$

Dowód. Część (1) wynika z twierdzenia 3.2 i twierdzenia 2.3 (1). Część (2) wynika z twierdzenia 3.2, kolejnego twierdzenia 3.4 (1) oraz uwagi 2.4 (2). Część (3) wynika z twierdzenia 2.3 (3). □

Twierdzenie 3.4. *Niech* $\mathbf{L} = (l_{ij})_{i,j\in S}$ *będzie laplasjanem Markowa takim, że w grafie* $g(\mathbf{L})$ *dla ustalonego* $R \subseteq S$ *istnieje las o korzeniu* R. *Niech ponadto* $\tilde{\mathbf{L}} = (\tilde{l}_{ij})_{i,j\in S}$ *będzie laplasjanem, którego elementy spełniają następujące nierówności*

$$C_L l_{ij} \geq \tilde{l}_{ij} \geq C_U l_{ij} \quad \text{dla } i \in S \setminus R,\ j \in S,\ i \neq j$$

oraz

$$0 < C_L \leq 1 \leq C_U.$$

Oznaczmy $u := s - |R|$. *Wtedy dla* $i, j \notin R$, $k \in R$:

$$\frac{C_L^{u-1}}{C_U^u}\mu_{ij}(R) \leq \tilde{\mu}_{ij}(R) \leq \frac{C_U^{u-1}}{C_L^u}\mu_{ij}(R); \tag{1}$$

$$\left(\frac{C_L}{C_U}\right)^u p_{ik}(R) \leq \tilde{p}_{ik}(R) \leq \left(\frac{C_U}{C_L}\right)^u p_{ik}(R); \tag{2}$$

$$\frac{C_L^{u-1}}{C_U^u}m_i(R) \leq \tilde{m}_i(R) \leq \frac{C_U^{u-1}}{C_L^u}m_i(R); \tag{3}$$

(4) *dla ŁM z czasem dyskretnym*

$$\tilde{\sigma}_i^2(R) \leq \frac{C_U^{2(u-1)}}{C_L^{2u}}\left\{\sigma_i^2(R) + (1-C_L)m_i(R) + \left[1 - \left(\frac{C_L}{C_U}\right)^{u-1} m_i^2(R)\right]\right\}$$

oraz

$$\frac{C_L^{2(u-1)}}{C_U^{2u}}\left\{\sigma_i^2(R) - (1-C_L)m_i(R) + \left[1 - \left(\frac{C_U}{C_L}\right)^{u-1} m_i^2(R)\right]\right\} \leq \tilde{\sigma}_i^2(R);$$

(4′) *dla ŁM z czasem ciągłym*

$$\tilde{\sigma}_i^2(R) \leq \frac{C_U^{2(u-1)}}{C_L^{2u}}\left\{\sigma_i^2(R) + \left[1 - \left(\frac{C_L}{C_U}\right)^{u-1} m_i^2(R)\right]\right\}$$

oraz

$$\frac{C_L^{2(u-1)}}{C_U^{2u}}\left\{\sigma_i^2(R) + \left[1 - \left(\frac{C_U}{C_L}\right)^{u-1} m_i^2(R)\right]\right\} \leq \tilde{\sigma}_i^2(R).$$

Dowód. Części (1)–(3) otrzymujemy analogicznie do dowodu twierdzenia 3.2 wykorzystując twierdzenie 2.4 (1)–(3).

(4) Zauważmy, że dla dowolnych $i, j \notin R$, wagi lasów zawartych w $g(\tilde{\mathbf{L}})$ takich, że $f \in F_{ij}(R \cup \{j\})$ są iloczynami $u-1$ elementów macierzy $\tilde{\mathbf{L}}$. Stąd i z twierdzenia 2.4 (4) otrzymujemy dla $i \in S$

$$\tilde{\sigma}_i^2(R) := \frac{\sum_{j\notin R} \tilde{w}_{ij}(R,j)\left[\sum_{k\notin R} \tilde{w}_{jk}(R,k)(2+\tilde{l}_{kR}) - \sum_{l\notin R} \tilde{w}_{il}(R,l)\right]}{\tilde{w}^2(R)}$$

$$\leq \frac{C_U^{u-1}\sum_{j\notin R} w_{ij}(R,j)\left\{C_U^{u-1}\sum_{k\notin R} w_{jk}(R,k)[2+C_L l_{kR}] - C_L^{u-1}\sum_{l\notin R} w_{il}(R,l)\right\}}{C_L^{2u} w^2(R)}$$

$$= \frac{C_L^{2(u-1)}}{w^2(R) C_U^{2u}}\left[2\sum_{j\notin R,\, k\notin R} w_{ij}(R,j) w_{jk}(R,k)\right.$$

$$\left. + C_L \sum_{j\notin R,\, k\notin R} w_{ij}(R,j) w_{jk}(R,k) l_{kR} - \left(\frac{C_L}{C_U}\right)^{u-1} \sum_{j\notin R,\, l\notin R} w_{ij}(R,j) w_{il}(R,l)\right]$$

$$= \frac{C_U^{2(u-1)}}{C_L^{2u}}\left\{\sigma_i^2(R) + \varepsilon m_i(R) + \left[1 - \left(\frac{C_L}{C_U}\right)^{u-1}\right] m_i^2(R)\right\}.$$

Podobnie dowodzimy, że

$$\frac{C_L^{2(u-1)}}{C_U^{2u}}\left\{\sigma_i^2(R) - (1-C_L) m_i(R) + \left[1 - \left(\frac{C_U}{C_L}\right)^{u-1}\right] m_i^2(R)\right\} \leq \tilde{\sigma}_i^2(R).$$

Część (4') dowodzimy podobnie do części (4), korzystając z twierdzenia 2.4 (4'). □

W dalszej części rozdzialu rozważać będziemy zaburzenia laplasjanu Markowa $\mathbf{L}$ i nieujemnego wektora $\mathbf{b}$ wywołane reprezentacją zmiennoprzecinkową oraz wykonywaniem działań w arytmetyce zmiennoprzecinkowej o jednostce zaokrąglenia ε. Dla analizy takich zaburzeń wprowadzimy pewną relację (por. [St], str. 407).

Powiemy, że dla ustalonego $k \in \mathbb{N}$, $\varepsilon_1 > 0$, funkcje $A, B : (0, \varepsilon_1) \to \mathbb{R}$ są k-równoważne (oznaczenie $A(\varepsilon) = \langle k \rangle B(\varepsilon)$), jeśli dla $\varepsilon \in (0, \varepsilon_1)$ spełnione są nierówności

$$(1-\varepsilon)^k \leq \frac{A(\varepsilon)}{B(\varepsilon)} \leq (1-\varepsilon)^{-k}.$$

Łatwo udowodnić poniższe lematy.

Lemat 3.1. *Niech $k, l \in \mathbb{N}$. Wtedy:*

(1) $A(\varepsilon) = \langle k \rangle A(\varepsilon)$;
(2) *Jeżeli* $A(\varepsilon) = \langle k \rangle B(\varepsilon)$, *to* $B(\varepsilon) = \langle k \rangle A(\varepsilon)$.
(3) *Jeżeli* $A(\varepsilon) = \langle k \rangle B(\varepsilon)$ *oraz* $B(\varepsilon) = \langle l \rangle C(\varepsilon)$, *to* $A(\varepsilon) = \langle k + l \rangle C(\varepsilon)$.

Lemat 3.2. *Załóżmy, że* $A(\varepsilon) = \langle k \rangle a$ *oraz* $B(\varepsilon) = \langle l \rangle b$ *dla pewnych* $k, l \in \mathbb{N}$ *oraz* $a, b \in \mathbb{R}$. *Wtedy:*

(1) $A(\varepsilon)B(\varepsilon) = \langle k + l \rangle ab$;
(2) *jeżeli* $B(\varepsilon), b \neq 0$, *to*
$$\frac{A(\varepsilon)}{B(\varepsilon)} = \langle k + l \rangle \frac{a}{b};$$
(3) *jeżeli* $A(\varepsilon), B(\varepsilon) \geq 0$ *lub* $A(\varepsilon), B(\varepsilon) \leq 0$,*to*
$$A(\varepsilon) + B(\varepsilon) = \langle k \vee l \rangle (a + b).\ ^{7})$$

W dalszej części rozdziału rozważać będziemy funkcje $A : (0, 1) \to \mathbb{R}^+$ takie, że
$$A(\varepsilon) := \frac{(1 + a_1\varepsilon) \dots (1 + a_l\varepsilon)}{(1 + a_{l+1}\varepsilon) \dots (1 + a_k\varepsilon)} a,$$
gdzie $a \geq 0$, $l \leq k$ oraz $|a_i| \leq 1$ dla $i = 1, \dots, k$. Oczywiście
$$A(\varepsilon) = \langle k \rangle a.$$
Funkcja A ma ponadto następujące własności [St, str. 408].

Lemat 3.3.

(1) *Istnieje* $\mu \in [-k, k]$ *takie, że*
$$A(\varepsilon) = 1 + \mu\varepsilon + O(\varepsilon^2) \quad \textit{przy } \varepsilon \to 0.$$
(2) *Jeśli* $k\varepsilon \leq 0.1$, *to* $|A(\varepsilon) - a| \leq 1.06k\varepsilon a$.

Rodzinę $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0, \varepsilon_1)\}$ laplasjanów Markowa rzędu $s \times s$ nazywać będziemy *względnie zaburzonym łańcuchem Markowa* (*WZŁM*) indukowanym przez laplasjan Markowa $\mathbf{L} = (l_{ij})_{i,j \in S}$ oraz $k_1 \in \mathbb{N}$, jeżeli dla dowolnych $i, j \in S$, $i \neq j$
$$-l_{ij}(\varepsilon) = \langle k_1 \rangle l_{ij}.$$

[7]) $a \vee b := \max(a, b)$; analogicznie $a \wedge b := \min(a, b)$

Rodzinę nieujemnych u-wymiarowych wektorów $\{\mathbf{b}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$, nazywać będziemy *względnie zaburzonym nieujemnym wektorem* (*WZNW*) indukowanych przez nieujemny wektor $\mathbf{b} = (b_i)_{i=1}^{u}$ oraz $l_1 \in \mathbb{N}$, jeżeli dla dowolnego $i = 1, \ldots, u$

$$b_i(\varepsilon) = \langle l_1 \rangle b_i.$$

Zauważmy, że dla $\varepsilon \in (0,\varepsilon_1)$, $g(\mathbf{L}(\varepsilon)) = g(\mathbf{L})$. Stąd oraz z lematów 3.1–3.2 otrzymujemy bezpośrednio

Stwierdzenie 3.1. *Niech dany będzie WZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *indukowany przez laplasjan* $\mathbf{L}$ *oraz* $k_1 \in \mathbb{N}$. *Niech* $F(R)$ *będzie zbiorem lasów w grafie* $g(\mathbf{L})$ *o korzeniu* $R \subseteq S$. *Przyjmijmy* $u := s - |R|$. *Wtedy:*

(1) $w(f)(\varepsilon) = \langle uk_1 \rangle w(f)$ *dla* $f \in F(R)$,

(2) $w(R)(\varepsilon) = \langle uk_1 \rangle w(R)$,

gdzie $w(f)(\varepsilon)$ *oraz* $w(R)(\varepsilon)$ *oznaczają odpowiednio wagi lasu* f *oraz zbioru lasów* $F(R)$ *w grafie* $g(\mathbf{L}(\varepsilon))$.

Kolejne wnioski określają wpływ zaburzeń wywołanych reprezentacją zmienno-przecinkową laplasjanu $\mathbf{L}$ na charakterystyki *ŁM*.

Wniosek 3.1. *Niech dany będzie zbiór* $R \subseteq S$ *oraz WZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *indukowany przez laplasjan* $\mathbf{L}$ *i* $k_1 \in \mathbb{N}$. *Niech ponadto dany będzie WZNW* $\{\mathbf{b}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *indukowany przez* l_1 *oraz wektor* $\mathbf{b}$ *rzędu* $u := s - |R|$. *Załóżmy, że w grafie* $g(\mathbf{L})$ *istnieje las o korzeniu* R. *Wtedy:*

(1) *rozwiązania* $\mathbf{x} = (x_i)_{i \in S \setminus R}$ *oraz* $\mathbf{x}(\varepsilon) = (x_i(\varepsilon))_{i \in S \setminus R}$ *układów równań liniowych*

$$\mathbf{L}(R|R)\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad \textit{oraz} \quad \mathbf{L}(R|R)(\varepsilon)\mathbf{x}(\varepsilon) = \mathbf{b}(\varepsilon)$$

spełniają dla $i \in S \setminus R$ *relacje*

$$x_i(\varepsilon) = \langle (2u-1)k_1 + l_1 \rangle x_i;$$

(2) *rozwiązania* $\mathbf{x} = (x_i)_{i \in S \setminus R}$ *oraz* $\mathbf{x}(\varepsilon) = (x_i(\varepsilon))_{i \in S \setminus R}$ *układów równań liniowych*

$$\mathbf{L}^T(R|R)\mathbf{x} = \mathbf{b} \quad \textit{oraz} \quad \mathbf{L}^T(R|R)(\varepsilon)\mathbf{x}(\varepsilon) = \mathbf{b}(\varepsilon)$$

spełniają dla $i \in S \setminus R$ *relacje*

$$x_i(\varepsilon) = \langle (2u-1)k_1 + l_1 \rangle x_i;$$

Dowód. Wniosek wynika z lematu 3.2 oraz twierdzenia 3.1 po podstawieniu

$$C_U := (1-\varepsilon)^{-k_1}, \quad C_L := (1-\varepsilon)^{k_1}$$
$$c_U := (1-\varepsilon)^{-l_1}, \quad c_L := (1-\varepsilon)^{l_1}.$$

□

Wniosek 3.2. *Niech dany będzie WZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *indukowany przez laplasjan* $\mathbf{L}$ *oraz* $k_1 \in \mathbb{N}$. *Wtedy dla* $i \in S$

$$\pi_i(\varepsilon) = \langle 2(s-1)k_1 \rangle \pi_i,$$

gdzie $\pi_i(\varepsilon)$ *są wyrazami rozkładu stacjonarnego ŁM o laplasjanie* $\mathbf{L}(\varepsilon)$.

Dowód. Wniosek ten dowodzimy podobnie do wniosku 3.1 wykorzystując wzór (2.8). Możemy również udowodnić go jako wniosek z twierdzenia 3.1 wykorzystując wzór (2.10). □

Podamy teraz analogiczny wynik dla macierzy granicznej $\mathbf{P}^*(\varepsilon) = \left(p^*_{ij}(\varepsilon)\right)_{i,j\in S}$ *ŁM* o laplasjanie $\mathbf{L}(\varepsilon)$.

Wniosek 3.3.

Niech dany będzie WZŁM $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *indukowany przez* $k_1 \in \mathbb{N}$ *oraz laplasjan* $\mathbf{L}$ *składający się z* $m \geq 1$ *klas powracających* C_k, $k \leq m$ *oraz zbioru stanów chwilowych* T. *Niech* $C := C_1 \dot\cup \ldots \dot\cup C_m$, $c := |C|$, $t := |T|$ *oraz* $c_k := |C_k|$ *dla* $k = 1, \ldots, m$. *Wtedy:*

$$p^*_{ij}(\varepsilon) = \langle 2(c_k - 1)k_1 \rangle p^*_{ij} \tag{1}$$

jeśli $i, j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$;

$$p^*_{ij}(\varepsilon) = \langle 2(c_k - 1 + t)k_1 \rangle p^*_{ij} \tag{2}$$

jeśli $i \in T$ *oraz* $j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$;

$$p^*_{ij}(\varepsilon) = p^*_{ij} = 0 \qquad \text{w pozostałych przypadkach.} \tag{3}$$

Dowód. Część (1) wynika z wniosku 3.2 i twierdzenia 2.3 (1). Część (2) wynika z wniosku 3.2, kolejnego wniosku 3.4 (2) oraz uwagi 2.4 (1). Część (3) wynika z twierdzenia 2.3 (3). □

Poniższy wniosek określa wielkość zaburzenia odpowiedników charakterystyk *WZŁM* zdefiniowanych na str. 32.

Wniosek 3.4. *Niech dany będzie WZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *indukowany przez* $k_1 \in \mathbb{N}$ *oraz laplasjan* $\mathbf{L}$*, dla którego, przy ustalonym* $R \subseteq S$*, w grafie* $g(\mathbf{L})$ *istnieje las o korzeniu* R*. Przyjmijmy* $u := s - |R|$*. Wtedy dla* $i, j \in S \setminus R$*,* $k \in R$*:*

(1) $\mu_{ij}(R)(\varepsilon) = \langle (2u-1)k_1 \rangle \mu_{ij}(R)$*;*

(2) $p_{ik}(R)(\varepsilon) = \langle 2uk_1 \rangle p_{ik}(R)$*;*

(3) $m_i(R)(\varepsilon) = \langle (2u-1)k_1 \rangle m_i(R)$.

(4) *dla ŁM z czasem dyskretnym*

$$\begin{aligned}
&|\sigma_i^2(R)(\varepsilon) - \sigma_i^2(R)| \\
&\leq (1-\varepsilon)^{-(4u-2)} \left\{\sigma_i^2(R) + \varepsilon m_i(R) + \left[1-(1-\varepsilon)^{2(u-1)}\right] m_i^2(R)\right\} - \sigma_i^2(R) \\
&= \left[(4u-2)\sigma_i^2(R) + m_i(R) + (2u-2)m_i^2(R)\right]\varepsilon + O(\varepsilon^2);
\end{aligned}$$

(4') *dla ŁM z czasem ciągłym*

$$\begin{aligned}
&|\sigma_i^2(R)(\varepsilon) - \sigma_i^2(R)| \\
&\leq (1-\varepsilon)^{-(4u-2)} \left\{\sigma_i^2(R) + \left[1-(1-\varepsilon)^{2(u-1)}\right] m_i^2(R)\right\} - \sigma_i^2(R) \\
&= \left[(4u-2)\sigma_i^2(R) + (2u-2)m_i^2(R)\right]\varepsilon + O(\varepsilon^2).
\end{aligned}$$

Dowód. Części (1)–(3) otrzymujemy analogicznie do dowodu wniosku 3.2 wykorzystując twierdzenie 3.4 (1)–(3).
(4) Jeśli w twierdzeniu 3.4 (4) podstawimy $C_U := (1-\varepsilon)^{-1}$, $C_L := 1-\varepsilon$, to otrzymamy

$$\begin{aligned}
&\sigma_i^2(R)(\varepsilon) - \sigma_i^2(R) \leq \\
&(1-\varepsilon)^{-(4u-2)} \left\{\sigma_i^2(R) + \varepsilon m_i(R) + \left[1-(1-\varepsilon)^{2(u-1)}\right] m_i^2(R)\right\} - \sigma_i^2(R). \quad (3.3)
\end{aligned}$$

oraz

$$\sigma_i^2(R) - \sigma_i^2(R)(\varepsilon) \leq$$

$$\sigma_i^2(R) - (1-\varepsilon)^{4u-2}\left\{\sigma_i^2(R) - \varepsilon m_i(R) + \left[1-(1-\varepsilon)^{-2(u-1)}\right] m_i^2(R)\right\}. \quad (3.4)$$

Oznaczmy prawe strony nierówności (3.3) i (3.4) odpowiednio przez $p_1(\varepsilon)$ oraz $p_2(\varepsilon)$. Łatwo zauważyć, że dla $u = 0, 1, 2, \ldots$

$$1-(1-\varepsilon)^{4u-2} \leq (1-\varepsilon)^{-(4u-2)} - 1$$

oraz

$$(1-\varepsilon)^{2u} + (1-\varepsilon)^{-2u} \leq (1-\varepsilon)^{4u-2} + (1-\varepsilon)^{-(4u-2)}.$$

Stąd wynika, że

$$\begin{aligned}
&\left[1-(1-\varepsilon)^{4u-2}\right]\sigma_i^2(R) + (1-\varepsilon)^{4u-2}\varepsilon m_i(R) \\
&+ \left[(1-\varepsilon)^{2u} - (1-\varepsilon)^{4u-2}\right] m_i^2(R) \\
&\leq \left[(1-\varepsilon)^{-(4u-2)} - 1\right]\sigma_i^2(R) + (1-\varepsilon)^{-(4u-2)}\varepsilon m_i(R) \\
&+ \left[(1-\varepsilon)^{-(4u-2)} - (1-\varepsilon)^{-2u}\right] m_i^2(R).
\end{aligned}$$

W rezultacie

$$p_2(\varepsilon) \leq p_1(\varepsilon).$$

Po rozwinięciu w szereg Maclaurina $p_1(\varepsilon)$ otrzymujemy tezę.

Część (4') dowodzimy podobnie do części (4), korzystając z twierdzenia 3.4 (4'). □

Uwagi 3.1.

(1) Rozwinięcia w lasy skierowane można traktować jako algorytmy dla obliczenia charakterystyk *ŁM*. Nie są to jednak algorytmy efektywne — takie algorytmy podamy w części 3.2. Istotnie, ze wzoru (2.5) wynika, że np. obliczenie π_i w przypadku, gdy $g(\mathbf{L})$ jest grafem zupełnym wymaga wykonania $(s-1)^{s-1}$ operacji arytmetycznych.

(2) Oszacowanie podane we wniosku 3.2 można poprawić — zachodzi bowiem asymptotyczna nierówność

$$|\pi_i(\varepsilon) - \pi_i| \leq 2(s-1)k_1(1-\pi_i)\pi_i\varepsilon + O(\varepsilon^2), \quad \text{dla } i \in S. \quad (3.5)$$

Dowód. Zauważmy, że dla $j \in S$

$$w(j)(\varepsilon) = \sum_{f \in F(j)} \prod_{(m,n)\in E_f} (1+\mu_{mn}\varepsilon)(-l_{mn}),$$

gdzie $|\mu_{mn}| \leq k_1$ dla $m, n \in S$.

Zatem z lematu 3.3 (1) wynika, że $w(j)(\varepsilon) = [1 + \mu_j\varepsilon + \varepsilon^2 p_j(\varepsilon)]w(j)$ dla pewnego wielomianu p_j oraz $\mu_j \in \mathbb{R}$ takiego, że $|\mu_j| \leq (s-1)k_1$. Stąd i z twierdzenia 2.1 (2) (a) otrzymujemy

$$\begin{aligned}\pi_i'(\varepsilon) &= \left[\frac{(1+\mu_i\varepsilon)w(i) + \varepsilon^2 p_j(\varepsilon)}{\sum_{j\in S}(1+\mu_j\varepsilon)w(j) + \varepsilon^2 p_j(\varepsilon)}\right]' \\ &= \frac{\mu_i w(i)\sum_{j\in S}(1+\mu_j\varepsilon)w(j) - (1+\mu_i\varepsilon)w(i)\sum_{j\in S}\mu_j w(j) + O(\varepsilon)}{\left[\sum_{j\in S}(1+\mu_j\varepsilon)w(j) + O(\varepsilon^2)\right]^2}.\end{aligned}$$

Stąd

$$\pi_i'(0) = \pi_i \sum_{j\neq i}(\mu_i - \mu_j)\pi_j \leq 2(s-1)k_1(1-\pi_i)\pi_i.$$

Podobnie otrzymujemy

$$-\pi_i'(0) \leq 2(s-1)k_1(1-\pi_i)\pi_i.$$

W rezultacie z równości

$$\pi_i(\varepsilon) = \pi_i + \pi_i'(0)\varepsilon + O(\varepsilon^2)$$

wynika (3.5). □

(3) Wniosek 3.1 wydaje się być najogólniejszym oszacowaniem tego typu w literaturze. Wnioski 3.2–3.4 są wariantami rezultatów Takahashiego [Ta], który wykorzystał rozwinięcia w lasy skierowane dla wyznacznika dowolnej macierzy, podane przez Botta i Mayberry'ego ([BoMa] — u mnie wniosek 2.1 (1)). Tweedie [Tw] i Seneta [Se] uogólnili wyniki Takahashiego na łańcuchy Markowa o przeliczalnym zbiorze stanów.

O'Cinneide [O'C 1], nie znając pracy Takahashiego i bez wykorzystania rozwinięć w lasy skierowane, oszacował zaburzenia dla rozkładu stacjonarnego nieprzywiedlnego *ŁM*. Wynik ten jest nieco słabszy od wniosku 3.2. Ten sam autor w pracy [O'C 2] podał oszacowanie zaburzenia elementów macierzy $\mathbf{L}(R|R)^{-1}$, w przypadku, gdy $\mathbf{L}$ jest laplasjanem Markowa oraz $R \subseteq S$. Rezultat ten jest nieco słabszy od wniosku 3.4 (1), i co ważniejsze, dowód O'Cinneide'a jest niepoprawny.

Ostatnio Xue [Xu], również bez wykorzystania rozwinięć w lasy skierowane, udowodnił oszacowanie równoważne wnioskowi 3.2.

Poniższy przykład pokazuje, że współczynniki występujące przy ε we wnioskach 3.2 i 3.4, a zatem i we wniosku 3.3 są prawie optymalne. Część (1) jest modyfikacją przykładu podanego przez O'Cinneide'a w pracy [O'C 1].

Przykład 3.1. (1) Rozważmy laplasjan $s \times s$ postaci

$$\mathbf{L}(\alpha,\beta) := \begin{bmatrix} \beta & -\beta & 0 & \dots & & \\ -\alpha & \alpha+\beta & -\beta & \dots & \mathbf{0} & \\ -\alpha & 0 & \alpha+\beta & \dots & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\alpha & 0 & 0 & \dots & \alpha+\beta & -\beta \\ -\alpha-\beta & 0 & 0 & \dots & 0 & \alpha+\beta \end{bmatrix}, \tag{3.6}$$

gdzie $\alpha, \beta > 0$. Układ (2.15) ma w tym przypadku postać:

$$\begin{cases} & & (\alpha+\beta)a_2 &=& \beta, \\ -\beta a_2 & + & (\alpha+\beta)a_3 &=& 0, \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\beta a_{s-1} & + & (\alpha+\beta)a_s &=& 0. \end{cases}$$

Stąd i z warunku $a_1 = 1$ wynika, że

$$\begin{cases} a_1 = 1, \\ a_j = a_{j-1}\beta(\alpha+\beta)^{-1}, \quad \text{dla } j = 2, \dots, s. \end{cases} \tag{3.7}$$

Czyli po podstawieniu $\gamma := \beta(\alpha+\beta)^{-1}$, otrzymujemy

$$\begin{aligned} &a_j = \gamma^{j-1} \quad \text{oraz} \\ &\pi_j = \frac{a_j}{a_1 + \ldots + a_s} = \frac{1-\gamma}{1-\gamma^s}\gamma^{j-1} \quad \text{dla } j = 1, \dots, s. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Niech teraz $0 < \delta, \varepsilon < 1$. Przyjmijmy

$$\alpha = (1-\delta) \quad \text{oraz} \quad \beta = \delta\left(1 + \frac{1-\delta}{1+\delta}\varepsilon\right).$$

Łatwo zauważyć, że $\tilde{\mathbf{L}} := \mathbf{L}(\alpha,\beta) = \mathbf{L}(\varepsilon,\delta)$ oraz $\mathbf{L} = \mathbf{L}(0,\delta)$ są laplasjanami Markowa spełniającymi założenia twierdzeń 3.2—3.4. (Podstawienie to w odróżnieniu od podstawienia O'Cinneide'a obejmuje również przypadek dyskretny).

Niech $\tilde{\pi} := \pi(\varepsilon, \delta)$, $\pi := \pi(0, \delta)$ oznaczają rozkłady stacjonarne odpowiadające laplasjanom $\tilde{\mathbf{L}}$, $\mathbf{L}$. Po podstawieniu $\delta := \varepsilon^2$ otrzymujemy z (3.8) dla $j = 1, \ldots, s$

$$f_j(\varepsilon) := \frac{\pi_j(\varepsilon, \varepsilon^2)}{\pi_j(0, \varepsilon^2)} = \frac{h_\varepsilon^{(s-j)} \left[g_\varepsilon^{j-1} h_\varepsilon - \varepsilon^2 g_\varepsilon^j - \varepsilon^{2s} g_\varepsilon h_\varepsilon + \varepsilon^{2(s+1)} g_\varepsilon^2 \right]}{h_\varepsilon^s - \varepsilon^2 h_\varepsilon^s - \varepsilon^2 g_\varepsilon^s + \varepsilon^4 g_\varepsilon},$$

gdzie $g_\varepsilon := 1 + \varepsilon + \varepsilon^2 - \varepsilon^3$ oraz $h_\varepsilon := 1 - \varepsilon + \varepsilon^2 + \varepsilon^3$. Stąd $f_j(0) = 1$ oraz $f_j'(0) = 2(j-1)$. W rezultacie

$$\tilde{\pi}_s - \pi_s = 2(s-1)\pi_s \varepsilon + O(\varepsilon^2).$$

(2) Przyjmijmy $R := \{1, s\}$ oraz $a_{ij} := p_{ij}(R)$ dla $i \notin R$, $j \in R$. Z twierdzenia 3.3 [Io] wynika, że macierz $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i \notin R,\, j \in R}$ spełnia równanie $\mathbf{L}(R|R)\mathbf{A} = -\mathbf{L}(R|S-R)$. Zatem dla laplasjanu $\mathbf{L}(\alpha, \beta)$ otrzymujemy układ

$$\begin{bmatrix} \alpha+\beta & -\beta & 0 & & \\ 0 & \alpha+\beta & -\beta & \mathbf{0} & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ & & & \alpha+\beta & -\beta \\ & \mathbf{0} & & 0 & \alpha+\beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{21} & a_{2s} \\ a_{31} & a_{3s} \\ \cdots & \cdots \\ a_{s-2,1} & a_{s-2,s} \\ a_{s-1,1} & a_{s-1,s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha & 0 \\ \alpha & 0 \\ \cdots & \cdots \\ \alpha & 0 \\ \alpha & \beta \end{bmatrix} \tag{3.9}$$

Oczywiście $a_{i1} = 1 - a_{is}$ dla $i = 2, \ldots, s-1$, więc (3.9) jest równoważny układowi

$$\begin{cases} (\alpha+\beta)a_{2s} & -\beta a_{3s} & = 0, \\ (\alpha+\beta)a_{3s} & -\beta a_{4s} & = 0, \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ (\alpha+\beta)a_{s-2s} & -\beta a_{s-1,s} & = 0, \\ (\alpha+\beta)a_{s-1,s} & & = \beta. \end{cases} \tag{3.10}$$

Stąd $a_{s-j,s} = \gamma^j$ dla $j = 1, \ldots, s-2$. Po podstawieniu jak w (1), otrzymujemy

$$f_j(\varepsilon) := \frac{a_{s-j,s}(\varepsilon, \varepsilon^2)}{a_{s-j,s}(0, \varepsilon^2)} = \left(\frac{g_\varepsilon}{h_\varepsilon} \right)^j.$$

Stąd $f_j(0) = 1$ oraz $f_j'(0) = 2j$ dla $j = 1, \ldots, s-2$. W rezultacie

$$\tilde{p}_{2s}(R) - p_{2s}(R) = 2(s-2)p_{2s}(R)\varepsilon + O(\varepsilon^2).$$

Podobne rozumowanie można przeprowadzić dla $R = \{1, 2, \ldots, r, s\}$, gdzie $1 \le r < s-1$.

(3) Z twierdzenia 3.2 [Io] wynika, że wektor $\mathbf{m}(R)$ spełnia równanie

$$\mathbf{L}(R\big|R)\mathbf{m}(R) = \mathbf{e}_{s-r}.$$

Przyjmijmy $R := \{s-r+1, \dots, s\}$. Wtedy dla laplasjanu $\mathbf{L}(\alpha, \beta)$ otrzymujemy układ

$$\begin{bmatrix} \beta & -\beta & & & \\ -\alpha & \alpha+\beta & -\beta & \mathbf{0} & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\alpha & & \alpha+\beta & -\beta & \\ -\alpha & \mathbf{0} & & \alpha+\beta & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ m_{s-r} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}, \tag{3.11}$$

gdzie $m_i = m_i(R)$ dla $i = 1, \dots, s-r$ oraz $r = |R|$. Układ (3.11) jest równoważny układowi

$$\begin{cases} (\alpha+\beta)m_u = 1 + \alpha m_1, & \\ (\alpha+\beta)m_{u-j} = 1 + \alpha m_1 + \beta m_{u-j+1}, & \text{dla } j = 1, \dots, u-2, \\ \beta m_1 = 1 + \beta m_2, & \text{gdzie } u := s-r. \end{cases} \tag{3.12}$$

Zatem dla $j = 0, \dots, u-2$

$$m_{u-j} = \frac{1+\alpha m_1}{\alpha}\left[1 + \left(\frac{\beta}{\alpha+\beta}\right)^{j+1}\right]. \tag{3.13}$$

W szczególności

$$m_2 = \frac{1+\alpha m_1}{\alpha}\left[1 + \left(\frac{\beta}{\alpha+\beta}\right)^{u-1}\right].$$

Stąd i z ostatniego równania układu (3.12) wynika, że

$$m_1 = \frac{1}{\alpha}\left[\left(\frac{\alpha+\beta}{\beta}\right)^{u} - 1\right].$$

W rezultacie z (3.13) otrzymujemy dla $j = 1, \dots, u$

$$\begin{aligned} m_j &= \frac{(\alpha+\beta)^{j-1}\left[(\alpha+\beta)^{u-j+1} - \beta^{u-j+1}\right]}{\alpha\beta^u} \\ &= \alpha^{-1}\left(\gamma^u - \gamma^{-j+1}\right). \end{aligned}$$

Po podstawieniu jak w (1), otrzymujemy dla $j = 1, \dots, u$

$$f_j(\varepsilon) := \frac{m_j(\varepsilon, \varepsilon^2)}{m_j(0, \varepsilon^2)} = \frac{h_\varepsilon^u - \varepsilon^{2(u-j+1)} g_\varepsilon^{u-j+1} h_\varepsilon^{j-1}}{\left(1 - \varepsilon + \varepsilon^{2(u-j+1)+1} - \varepsilon^{2(u-j+1)}\right) g_\varepsilon^u},$$

stąd $f_j(0) = 1$ oraz $f_j'(0) = -(2u-1)$.

W rezultacie dla $j = 1, \dots, u$

$$m_j - \tilde{m}_j = (2u-1)m_j\varepsilon + O(\varepsilon^2).$$

(4) Z twierdzenia 3.2 [Io] wynika, że wektor $\mathbf{m}^{(2)}(R)$ spełnia w przypadku dyskretnym równanie

$$\mathbf{L}(R\big|R)\mathbf{m}^{(2)}(R) = 2\mathbf{P}(R\big|R)\mathbf{m}(R) + \mathbf{e}_u.$$

Niech $R := \{u+1, \dots, s\}$. Dla laplasjanu $\mathbf{L}(\alpha, \beta)$ powyższy układ jest równoważny układowi

$$\begin{cases} (\alpha+\beta)\left(m_u^{(2)} + 2m_u\right) & = \alpha\left(m_1^{(2)} + 2m_1\right) + 2m_u + 1, \\ (\alpha+\beta)\left(m_{u-j}^{(2)} + 2m_{u-j}\right) & = \alpha\left(m_1^{(2)} + 2m_1\right) + \beta\left(m_{u-j+1}^{(2)} + 2m_{u-j+1}\right) \\ & \quad +2m_{u-j} + 1 \quad \text{dla } j = 1, \dots, u-2, \\ \beta\left(m_1^{(2)} + 2m_1\right) & = \beta\left(m_2^{(2)} + 2m_2\right) + 2m_1 + 1. \end{cases} \tag{3.14}$$

Zatem dla $j = 0, \dots, u-2$ otrzymujemy

$$\begin{aligned} m_{u-j}^{(2)} + 2m_{u-j} = & \Big\{ \Big[\alpha\left(m_1^{(2)} + 2m_1\right) + 1\Big]\left[(\alpha+\beta)^{j+1} - \beta^{j+1}\right]\alpha^{-1} \\ & + 2\left[\beta^j m_u + \beta^{j-1}(\alpha+\beta)m_{u-1} + \dots\right. \\ & \left. + \ \beta(\alpha+\beta)^{j-1}m_{u-j+1} + (\alpha+\beta)^j m_{u-j}\right]\Big\}(\alpha+\beta)^{j+1}. \end{aligned} \tag{3.15}$$

Z równania (3.15) dla $j = u-2$ oraz ostatniego równania układu (3.14) wynika, że

$$\begin{aligned} m_1^{(2)} + 2m_1 = & \left[2(\alpha+\beta)^{2u} - (2-\alpha)\beta^u(\alpha+\beta)^u\right. \\ & \left. -2u\alpha\beta^u(\alpha+\beta)^{u-1} - \alpha\beta^{2u}\right]\alpha^{-2}\beta^{-2u}. \end{aligned}$$

Stąd i z (3.15) otrzymujemy dla $j = 1, \dots, u$

$$\begin{aligned} m_j^{(2)} = & \left[2(\alpha+\beta)^{2u} - 2\beta^{u-j+1}(\alpha+\beta)^{u+j-1} - \alpha\beta^u(\alpha+\beta)^u\right. \\ & - 2u\alpha\beta^u(\alpha+\beta)^{u-1} + 2(j-1)\alpha\beta^{2u-j+1}(\alpha+\beta)^{j-2} \\ & \left. +\alpha\beta^{2u-j+1}(\alpha+\beta)^{j-1}\right]\alpha^{-2}\beta^{-2u}. \end{aligned}$$

W rezultacie

$$\begin{aligned} \sigma_j^2 = & m_j^{(2)} - m_j^2 \\ = & \left\{(\alpha+\beta)^{2u} - 2\beta^{2(u-j+1)}(\alpha+\beta)^{2(j-1)} - (\alpha+\beta+2u)\alpha\beta^u(\alpha+\beta)^{u-1}\right. \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+ \left[\alpha+\beta+2(j-1)\right]\alpha\beta^{2u-j+1}(\alpha+\beta)^{j-2}\Big\}\,\alpha^{-2}\beta^{-2u}\\
=&\alpha^{-2}\left(\gamma^{-2u}-\gamma^{-2(j-1)}\right)-\alpha^{-1}\left(\gamma^{-u}-\gamma^{-j+1}\right)\\
&-(\alpha+\beta)^{-1}\alpha^{-1}\left[2u\gamma^{-u}-2(j-1)\gamma^{-j+1}\right].
\end{aligned}
$$

Po podstawieniu jak w (1) otrzymujemy dla $j=1,\ldots,u$

$$
\begin{aligned}
f_j(\varepsilon) :=& \frac{\sigma_j^2(\varepsilon,\varepsilon^2)}{\sigma_j^2(0,\varepsilon^2)} =\\
&=\Big\{h_\varepsilon^{2u}-(\varepsilon^2 g_\varepsilon)^{2(u-j+1)}h_\varepsilon^{2(j-1)}\\
&\quad-\left[h_\varepsilon+2u\varepsilon^2(1-\varepsilon^2)\right](1-\varepsilon^2)(1-\varepsilon)\varepsilon^{u-2}g_\varepsilon^u h_\varepsilon^{u-1}\\
&\quad+\left[h_\varepsilon+2(j-1)\varepsilon^2(1-\varepsilon^2)\right](1-\varepsilon^2)(1-\varepsilon)\varepsilon^{2u-j-1}g_\varepsilon^{2u-j+1}h_\varepsilon^{j-2}\Big\}\,/\\
&\quad\Big\{\left[1-\varepsilon^{4(u-j+1)}+(1+2u\varepsilon^2)(1-\varepsilon^2)\varepsilon^{2u-2}\right.\\
&\quad+\left.\left(1+2(j-1)\varepsilon^2\right)(1-\varepsilon^2)\varepsilon^{4m-2j}\right](1-\varepsilon)^2 g_\varepsilon^{2u}\Big\}.
\end{aligned}
$$

Stąd $f_j(0)=1$ oraz $f_j'(0)=-(4u-2)$.

W rezultacie dla $j=1,\ldots,u$

$$\sigma_j^2-\tilde{\sigma}_j^2=[4(s-r)-2]\sigma_j^2\varepsilon+O(\varepsilon^2). \qquad \square$$

3.2. **Algorytmy.**

W tej części rozdziału zaprezentujemy algorytmy dla analizowanych wcześniej układów równań liniowych związanych z podmacierzami głównymi laplasjanu Markowa. Następnie oszacujemy względny błąd rozwiązania (entrywise relative error) tych algorytmów.

Rozważmy układ równań

$$\mathbf{L}^T(R|R)\mathbf{x}=\mathbf{b}, \tag{3.16}$$

gdzie $\mathbf{b}$ jest nieujemnym wektorem $u:=s-|R|$ wyrazowym oraz, dla prostoty, $R=\{u+1,\ldots,s\}$. Załóżmy, że w grafie indukowanym przez $\mathbf{L}$ istnieje las o korzeniu R. Z lematu 2.2 (1) oraz stwierdzenia 2.5 wynika, że macierz $\mathbf{L}(R|R)$ jest wtedy odwracalna oraz wszystkie jej elementy diagonalne są dodatnie.

Najczęściej spotykany w praktyce problem obliczeniowy związany z $\acute{L}M$ polega na wyznaczeniu rozkładu stacjonarnego dla nieprzywiedlnego $\acute{L}M$ zadanego przez

laplasjan $\mathbf{L}$, czyli na rozwiązaniu układu

$$\mathbf{L}^T\boldsymbol{\pi} = \mathbf{0}_s, \text{ przy warunku } \sum_{i=1}^{s} \pi_i = 1. \tag{3.17}$$

Z twierdzenia 2.1 wynika, że dla rozwiązania tego układu wystarczy rozwiązać układ

$$\mathbf{L}_{11}^T\mathbf{a}_1 = -(l_{12}, \ldots, l_{1s})^T, \tag{3.18}$$

który jest przykładem układu (3.16), a następnie unormować wektor $\mathbf{a}^T := (1, \mathbf{a}_1^T)$.

W podanym niżej algorytmie, podobnie jak w metodzie eliminacji Gaussa, przekształcamy rozwiązywany układ równań (3.16) do równoważnego układu o macierzy górnej trójkątnej, a następnie otrzymany układ trójkątny rozwiązujemy przez podstawienie wstecz. Inaczej jednak obliczane są elementy główne. Oznaczmy:

$$\mathbf{L}_R^{(1)} := \left[\begin{array}{cc} \mathbf{L}^T(R|R) & -\mathbf{b} \\ \mathbf{l}_R^T & b \end{array}\right],$$

gdzie $\mathbf{l}_R^T := (l_{1R}, \ldots, l_{uR})$, $l_{iR} := \sum_{j\in R} l_{ij}$ dla $i = 1, \ldots, u$ oraz $b := \sum_{j=1}^{u} b_j$.

W kolejnym k-tym kroku metody ($k = 1, \ldots, u$) definiujemy indukcyjnie macierz $\mathbf{L}_R^{(k+1)}$ w następujący sposób:
– zapisujemy daną macierz $\mathbf{L}_R^{(k)}$ w postaci

$$\mathbf{L}_R^{(k)} = \left[\begin{array}{cc} u_k & \mathbf{y}_k^T \\ \mathbf{w}_k & \mathbf{A}_k \end{array}\right],$$

gdzie $\mathbf{w}_k, \mathbf{y}_k$ są wektorami $(u-k+1)$ wyrazowymi;
– następnie przyjmujemy

$$\mathbf{L}_R^{(k+1)} := \mathbf{A}_k - \frac{\mathbf{w}_k\mathbf{y}_k^T}{u_k}. \tag{3.19}$$

Łatwo zauważyć przez indukcję, że dla $k = 1, \ldots, u$, macierz $\mathbf{L}_R^{(k)}$ jest transponowanym laplasjanem Markowa rzędu $(u-k+2) \times (u-k+2)$ oraz wszystkie jej elementy diagonalne (z wyjątkiem ostatniego) są dodatnie. Stąd wynika, że elementy główne u_k spełniają równości

$$u_k = \sum_{j=k+1}^{u+1} w_{jk}, \tag{3.20}$$

gdzie w_{jk} są wyrazami wektora $\mathbf{w}_k$.

Doświadczenie numeryczne związane z wykorzystaniem eliminacji Gaussa do rozwiązywania modeli markowowskich wskazuje, że głównym źródłem niedokładności algorytmu jest odejmowanie występujące przy obliczaniu elementów diagonalnych macierzy $L_R^{(k+1)}$ ze wzoru (3.19). Grassmam, Taksar i Heyman (1985) [GrTaHe] zaproponowali modyfikację eliminacji Gaussa dla problemu (3.17), w której elementy główne są obliczane bez odejmowania, korzystając z równości (3.20). Oto uogólnienie tego algorytmu dla problemu (3.16).

Algorytm 3.1.

input: Macierz nieosobliwa $\mathbf{L}(R|R)$ bez elementów diagonalnych, wektory $\mathbf{l}_R$ oraz $\mathbf{b}$.
output: Wektor $\mathbf{x}$.
begin
1) for $k = 1$ **to** u **do begin**
$l_{k,u+1} := l_{kR}$**;**
$l_{u+1,k} := b_k$
end;
2) { Eliminacja }
for $k = 1$ **to** u **do begin**
$u_k := -\sum_{j=k+1}^{u+1} l_{kj}$**;**
for $i, j = k+1,\ i \neq j$ **to** $u+1$ **do** $l_{ij} := l_{ij} - l_{ik}l_{kj}/u_k$
end;
3) { Podstawienie wstecz }
for $k = u$ **downto** 1 **do begin**
$x_k := \left(l_{u+1,k} - \sum_{j=k+1}^{u} l_{jk}x_j\right)/u_k$**;** write (x_k)
end
end.

Rozważmy teraz układ równań

$$\mathbf{L}(R|R)\mathbf{x} = \mathbf{b}, \tag{3.21}$$

gdzie $\mathbf{b}$ jest nieujemnym wektorem u wyrazowym. Układy postaci (3.21) rozwiązuje się np. w celu obliczenia wektora średnich czasów dojścia do zbioru R — z układu

$\mathbf{L}(R|R)\mathbf{m} = \mathbf{e}$, oraz macierzy rozkładu w chwili dojścia do zbioru R — z układu $\mathbf{L}(R|R)\mathbf{A} = -\mathbf{L}(R|S \setminus R)$.

Odpowiednikiem algorytmu 3.1 dla układu (3.21) jest następujący algorytm.

Algorytm 3.2.

input: Macierz nieosobliwa $\mathbf{L}(R|R)$ bez elementów diagonalnych, $\mathbf{l}_R, \mathbf{b}$.
output: Wektor $\mathbf{x}$.
begin
1) for $k = 1$ **to** u **do begin**
$l_{k,u+1} := l_{kR}$**;**
$l_{k,u+2} := b_k$
end;
2) **{** Eliminacja **}**
for $k = 1$ **to** u **do begin**
$u_k := -\sum_{j=k+1}^{u+1} l_{kj}$**;**
for $i, j = k+1,\ i \neq j$ **to** $i = u$**,** $j = u+2$ **do** $l_{ij} := l_{ij} - l_{ik}l_{kj}/u_k$
end;
3) **{** Podstawienie wstecz **}**
for $k = u$ **downto** 1 **do begin**
$x_k := \left(l_{k,u+2} - \sum_{j=k+1}^{u} l_{kj}x_j\right)/u_k$**;** write (x_k)
end
end.

Algorytmy 2.1, 3.1 oraz 3.2 wraz z twierdzeniem 2.2 prowadzą do algorytmu obliczającego macierz graniczną dowolnego *ŁM*.

Algorytm 3.3.

input: Laplasjan Markowa $\mathbf{L} = (l_{ij})_{i,j\in S}$ bez elementów diagonalnych.
output: Macierz graniczna $\mathbf{P}^*$.
begin
1) Znajdź (np. za pomocą algorytmu 2.1) podział zbioru S na klasy zamknięte $C_1, \ldots, C_m$, $m \geq 1$ oraz zbiór stanów nieistotnych T w grafie $g(\mathbf{L})$**;**
$C := C_1 \cup \ldots \cup C_m$**;**

2) **for** $k := 1$ **to** m **do**

Oblicz (np. za pomocą algorytmu 3.1) rozkład stacjonarny $\boldsymbol{\pi}_k = (\pi_i^k)_{i \in C_k}$ laplasjanu nieprzywiedlnego $\mathbf{L}_k := (l_{ij})_{i,j \in C_k}$**;**

3) $\mathbf{L}_0 := \left(\sum_{j \in C_k} l_{ij} \right)_{i \in T,\, k=1,\ldots,m}$**;**

Rozwiąż (np. za pomocą algorytmu 3.2) równanie macierzowe

$$\mathbf{L}(C\big|C)\mathbf{A} = -\mathbf{L}_0$$

ze względu na macierz $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i \in T,\, k=1,\ldots,m}$**;**

4) **for** $i, j \in S$ **do begin**

if $i, j \in C_k$ dla pewnego k **then** $p_{ij}^* := \pi_j^k$;

else if $i \in T$, $j \in C_k$ dla pewnego k **then** $p_{ij}^* := a_{ik}\pi_j^k$

else $p_{ij}^* := 0$**;**

write (p_{ij}^*)

end

end.

Uwagi 3.2.

(1) Algorytm 3.1 jest uogólnieniem algorytmu Grassmanna, Taksara i Heymana [GrTaHe] dla obliczania rozkładu stacjonarnego nieprzywiedlnej macierzy przejścia. Natomiast algorytm 3.2 jest uogólnieniem algorytmu Heymana i Reeves [HeRe] dla obliczania średniego czasu dojścia do ustalonego zbioru stanów $R \subseteq S$.

(2) Koszt algorytmów 3.1 i 3.2 wyrażający się liczbą operacji arytmetycznych jest asymptotycznie równoważny kosztowi metody eliminacji Gaussa tj. $s^3/3$, ponieważ dodatkowy koszt związany z obliczeniem elementów głównych z równości (3.20) oraz z wykorzystaniem algorytmu Gilla–Möllera jest rzędu s^2.

3.3. **Analiza algorytmów.**

Oszacujemy teraz względny błąd rozwiązania (*entrywise relative error*) dla algorytmów 3.1 i 3.2.

Niech x, y będą dowolnymi liczbami rzeczywistymi w reprezentacji zmiennoprzecinkowej z błędem zaokrąglenia ε. Niech ponadto dla $\square \in \{+, -, *, /\}$

$$\mathrm{fl}(x \square y) \equiv \mathrm{fl}(x \square y)(\varepsilon)$$

oznacza wynik operacji "$\square$" w arytmetyce zmiennoprzecinkowej. Zakładać będziemy, że

$$\mathrm{fl}(x \square y) = \langle 1 \rangle (x \square y)$$

oraz, że wszystkie działania wykonywane są bez nadmiaru i niedomiaru.

Twierdzenie 3.5. *Przy założeniach wniosku 3.1 algorytm* 3.2 *oblicza wektor*

$$\bar{\mathbf{x}}(\varepsilon) = (\bar{x}_i(\varepsilon))_{i \in S \setminus R}$$ [8])

z dokładnością określoną przez relację

$$\bar{x}_i(\varepsilon) = \langle \psi(u) \rangle x_i, \quad \textit{gdzie } \psi(u) = 5u^2 + 13u - 16.$$

Jeżeli dodatkowo $\psi(u)\varepsilon \leq 0.1$, *to*

$$|\bar{x}_i(\varepsilon) - x_i| \leq 1.06 \psi(u) x_i \varepsilon \quad \textit{dla } i \in S \setminus R.$$

Dowód. Załóżmy dla wygody, że $R = \{u+1, \ldots, s\}$. Załóżmy ponadto dla dowodu, że macierz $\mathbf{L}(R\big|R)$ bez elementów diagonalnych, oraz wektory $\mathbf{l}_R$ i $\mathbf{b}$ są reprezentowane dokładnie w arytmetyce zmiennoprzecinkowej. Skonstruujemy indukcyjnie dla $n = 1, \ldots, u$ funkcję ψ_1 taką, że dla macierzy $\mathbf{L}(R\big|R)$ rzędu $n \times n$ oraz wektorów $\mathbf{l}_R$ oraz $\mathbf{b}$ rzędu n, algorytm 3.2 szacuje wektor $\mathbf{x}(\varepsilon)$ za pomocą wektora $\bar{\mathbf{x}}(\varepsilon)$ z dokładnością określoną przez relację

$$\bar{x}_i(\varepsilon) = \langle \psi_1(n) \rangle x_i \quad \text{dla } i = 1, \ldots, n. \tag{3.22}$$

Dla macierzy $\mathbf{L}(R\big|R)$ rzędu 1 można przyjąć $\psi_1(1) = 0$. Załóżmy zatem, że istnieje funkcja ψ_1 spełniająca równość (3.22) dla macierzy $\mathbf{L}(R\big|R)$ rzędu $< n$. Naszym celem będzie podanie wartości $\psi_1(n)$.

[8]) "kreska" oznaczać będzie wartości obliczane przez algorytm 3.2

Elementy główne u_k są sumami nieujemnych składników, zatem błąd zaokrąglenia powstały przy obliczeniu u_1 za pomocą algorytmu Gilla–Möllera (patrz np. [Hig], wzór (4.8)) można oszacować z relacji

$$\bar{u}_1(\varepsilon) = \langle 2 \rangle u_1.$$

Stąd oraz ze wzoru (3.19) wynika, że błąd zaokrąglenia powstały przy obliczeniu elementów niediagonalnych macierzy $\bar{\mathbf{L}}_R^{(2)}(\varepsilon)$ określają relacja

$$\bar{l}_{ij}^{(2)}(\varepsilon) = \langle 5 \rangle l_{ij}.$$

Stąd oraz z wniosku 3.1 wynika, że rozwiązanie dokładne $\bar{\mathbf{x}}^{(2)}(\varepsilon)$ układu

$$\bar{\mathbf{L}}_R^{(2)}(\varepsilon)\bar{\mathbf{x}}^{(2)}(\varepsilon) = \bar{\mathbf{b}}^{(2)}(\varepsilon)$$

spełnia relację

$$\bar{x}_i^{(2)}(\varepsilon) = \langle 10n \rangle x_i^{(2)} \quad \text{dla } i = 2, \ldots, n.$$

Zatem z założenia indukcyjnego wektor $\mathbf{x}^{(2)}$ jest liczony przez algorytm 3.2 z dokładnością określoną przez relację

$$\bar{\bar{x}}_i^{(2)}(\varepsilon) = \langle \psi_1(n-1) + 10n \rangle x_i^{(2)} \qquad \text{dla } i = 2, \ldots, n.$$

Ponadto $\mathbf{x}^T = \left(x_1, \mathbf{x}^{(2)^T}\right)$ oraz x_1 jest obliczany przez podstawienie wstecz i sumowanie za pomocą algorytmu Gilla–Möllera. Zatem wektor $\mathbf{x}$ jest obliczany z dokładnością określoną przez relację

$$\bar{x}_i(\varepsilon) = \langle \psi_1(n-1) + 10n + 6 \rangle x_i \quad \text{dla } i = 1 \ldots, n,$$

gdzie

$$\psi_1(n) = \psi_1(n-1) + 10n + 6. \tag{3.23}$$

Rozwiązanie równania (3.23) z warunkien $\psi_1(1) = 0$ daje

$$\psi_1(n) = 5n^2 + 11n - 16.$$

Udowodniliśmy, że dla danych reprezentowanych dokładnie, algorytm 3.2 oblicza wektor $\mathbf{x}$ z dokładnością określoną wzorem (3.22). Zatem dla danych reprezentowanych w arytmetyce zmiennoprzecinkowej z błędem zaokrąglenia ε, otrzymujemy z twierdzenia 3.1 relację

$$\bar{x}_i(\varepsilon) = \langle \psi(n) \rangle x_i, \quad \text{gdzie}$$
$$\psi := \psi_1(n) + 2n.$$

Druga część tezy wynika z lematu 3.3 (2). □

W podobny sposób udowodnić można następujące twierdzenia.

Twierdzenie 3.6. *Niech* $\mathbf{L}$ *będzie nieprzywiedlnym laplasjanem Markowa rzędu* $s \times s$*. Wtedy algorytm* 3.1 *oblicza rozkład stacjonarny* $\boldsymbol{\pi}$ *laplasjanu* $\mathbf{L}$ *z dokładnością określoną przez relację*

$$\bar{\pi}_i(\varepsilon) = \langle \phi(s) \rangle \pi_i \quad dla\ i = 1, \ldots, s,$$

gdzie $\phi(s) = 10s^2 + 6s - 46$*. Jeżeli dodatkowo* $\phi(s)\varepsilon \leq 0.1$*, to*

$$|\bar{\pi}_i(\varepsilon) - \pi_i| \leq 1.06\phi(s)\pi_i\varepsilon \quad dla\ i = 1, \ldots, s.$$

Twierdzenie 3.7. *I. Załóżmy, że przestrzeń stanów ŁM o laplasjanie* $\mathbf{L}$ *rzędu* $s \times s$*, składa się z* m *klas powracających* C_k $(k \leq m)$ *oraz zbioru stanów chwilowych* T*. Niech* $t := |T|$ *oraz* $c_k := |C_k|$ *dla* $k = 1, \ldots, m$*. Wtedy algorytm* 3.3 *oblicza macierz graniczną* $\mathbf{P}^*$ *z dokładnością określoną przez relacje:*

$$\bar{p}^*_{ij}(\varepsilon) = \langle \phi(c_k) \rangle p^*_{ij} \tag{1}$$

jeśli $i, j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$*;*

$$\bar{p}^*_{ij}(\varepsilon) = \langle \phi(c_k) + \psi(t) \rangle p^*_{ij} \tag{2}$$

jeśli $i \in T$ *oraz* $j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$*;*

$$\bar{p}^*_{ij}(\varepsilon) = p^*_{ij} = 0 \qquad w\ pozostałych\ przypadkach. \tag{3}$$

II. Jeżeli dodatkowo $\max_{1 \leq k \leq m} \phi(c_k)\psi(t)\varepsilon \leq 0.1$*, to:*

$$|\bar{p}^*_{ij}(\varepsilon) - p^*_{ij}| \leq 1.06\phi(c_k)p^*_{ij} \tag{1}$$

jeśli $i, j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$*;*

$$|\bar{p}^*_{ij}(\varepsilon) - p^*_{ij}| \leq 1.06(\phi(c_k) + \psi(t))p^*_{ij}\varepsilon \tag{2}$$

jeśli $i \in T$ *oraz* $j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$*.*

Dowód. Części I (1) i II (1) wynikają z twierdzenia 3.6 (1) oraz twierdzenia 2.2 (1). Części I (2) i II (2) wynikają z twierdzenia 3.6, kolejnego twierdzenia 3.8 oraz twierdzenia 2.2 (2). Część I (3) wynika z twierdzenia 2.2 (3). □

Twierdzenie 3.8. *I. Niech* $\mathbf{L}$ *będzie laplasjanem Markowa rzędu* $s \times s$*, w którym dla ustalonego* $R \subseteq S$ *istnieje las o korzeniu* R*. Przyjmijmy* $u := s - |R|$*,* $\psi(u) := 5u^2 + 13u - 16$*,* $\chi(u) := 5u^2 + 6u - 11$*. Wtedy dla* $i, j \in S \setminus R$*,* $k \in R$*, algorytm* 3.2 *oblicza następujące charakterystyki ŁM z dokładnością określoną przez relacje:*

$$\bar{\mu}_{ik}(R)(\varepsilon) = \langle \chi(u) \rangle \mu_{ik}(R); \tag{1}$$

$$\bar{p}_{ik}(R)(\varepsilon) = \langle \psi(u) \rangle p_{ik}(R); \tag{2}$$

$$\bar{m}_i(R)(\varepsilon) = \langle \chi(u) \rangle m_i(R). \tag{3}$$

II. Jeżeli dodatkowo $\chi(u)\varepsilon \leq 0.1$*, to:*

$$|\bar{\mu}_{ik}(R)(\varepsilon) - \mu_{ik}(R)| \leq 1.06\chi(u)\mu_{ik}(R)\varepsilon; \tag{1}$$

jeżeli dodatkowo $\psi(u)\varepsilon \leq 0.1$*, to:*

$$|\bar{p}_{ij}(R)(\varepsilon) - p_{ij}(R)| \leq 1.06\psi(u)p_{ij}(R)\varepsilon; \tag{2}$$

jeżeli dodatkowo $\chi(u)\varepsilon \leq 0.1$*, to:*

$$|\bar{m}_i(R)(\varepsilon) - m_i(R)| \leq 1.06\chi(u)m_i(R)\varepsilon. \tag{3}$$

Uwagi 3.3.

(1) Twierdzenie 3.6 jest uogólnieniem wyniku O'Cinneide'a [O'C 1, twierdzenie 3], ponieważ nie ma w nim założenia, że elementy główne są obliczane w podwójnej precyzji oraz, że laplasjan $\mathbf{L}$ jest w postaci zmiennoprzecinkowej.

(2) Twierdzenia 3.6–3.8 podają oszacowania błędu dla najprostszych i najbardziej znanych charakterystyk *ŁM*. W ostatnich latach zaprojektowano specjalne algorytmy dla obliczania mniej znanych charakterystyk nieprzywiedlnego *ŁM* — np. macierzy fundamentalnej [He] czy wariancji granicznej [Gr]. Algorytmy te sprowadzają laplasjan Markowa do postaci trójkątnej w podobny sposób jak algorytmy 3.1 i 3.2, jednak podstawienie wstecz wymaga odejmowania. Błąd zaokrąglenia zależy zatem w tym przypadku nie tylko od wielkości laplasjanu, ale również od uwarunkowania problemu.

4. Algorytmy dla potęgowo zaburzonych łańcuchów Markowa.

4.1. **Potęgowo zaburzone łańcuchy Markowa.**

Powiemy, że funkcje $A, B : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ są asymptotycznie równoważne przy $\varepsilon \to 0$ (oznaczenie $A(\varepsilon) \sim B(\varepsilon)$), jeśli

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{A(\varepsilon)}{B(\varepsilon)} = 1.$$

Jeśli natomiast istnieje $\varepsilon_1 \neq 0$ takie, że dla dowolnego $\varepsilon \in (-\varepsilon_1, \varepsilon_1)$, $A(\varepsilon) = 0$, to przyjmiemy dla jednolitości rozważań $A(\varepsilon) \sim 0$. Ponadto $\frac{0}{0} := 1$. Łatwo udowodnić następujące lematy.

Lemat 4.1.

(1) $A(\varepsilon) \sim A(\varepsilon)$.
(2) *Jeżeli* $A(\varepsilon) \sim B(\varepsilon)$, *to* $B(\varepsilon) \sim A(\varepsilon)$.
(3) *Jeżeli* $A(\varepsilon) \sim B(\varepsilon)$ *oraz* $B(\varepsilon) \sim C(\varepsilon)$, *to* $A(\varepsilon) \sim C(\varepsilon)$.

Lemat 4.2. *Załóżmy, że* $A(\varepsilon) \sim B(\varepsilon)$ *oraz* $C(\varepsilon) \sim D(\varepsilon)$. *Wtedy*

(1) $A(\varepsilon)C(\varepsilon) \sim B(\varepsilon)D(\varepsilon)$.
(2) *Jeżeli dodatkowo istnieje* $\varepsilon_1 \neq 0$ *takie, że dla dowolnego* $\varepsilon \in (-\varepsilon_1, \varepsilon_1)$, $A(\varepsilon), B(\varepsilon), C(\varepsilon), D(\varepsilon) > 0$ *lub* $A(\varepsilon), B(\varepsilon), C(\varepsilon), D(\varepsilon) < 0$, *to* $A(\varepsilon) + C(\varepsilon) \sim B(\varepsilon) + D(\varepsilon)$.

Lemat 4.3. *Załóżmy, że* $A(\varepsilon) \sim \alpha\varepsilon^a$ *oraz* $B(\varepsilon) \sim \beta\varepsilon^b$ *dla* $A, B : (0, \varepsilon_1) \to \mathbb{R}^+$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, $a, b \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ [9]). *Wtedy:*

(1) *jeśli* $[\alpha\mathbf{1}(a \leq b) \pm \beta\mathbf{1}(a \geq b)] \neq 0$ *lub* $\alpha\beta = 0$, *to*

$$A(\varepsilon) \pm B(\varepsilon) \sim [\alpha\mathbf{1}(a \leq b) \pm \beta\mathbf{1}(a \geq b)]\varepsilon^{(a \wedge b)};$$

(2) $A(\varepsilon)B(\varepsilon) \sim \alpha\beta\varepsilon^{a+b}$;
(3) *jeśli* $\beta \neq 0$, *to*

$$\frac{A(\varepsilon)}{B(\varepsilon)} \sim \frac{\alpha}{\beta}\varepsilon^{a-b}.$$

[9]) Przyjmiemy $\varepsilon^\infty := 0$; ponadto $A(\varepsilon) \sim 0 \cdot \varepsilon^\infty$, jeżeli $A(\varepsilon) \sim 0$

Rodzinę $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ laplasjanów Markowa rzędu $s \times s$ nazywać będziemy *potęgowo zaburzonym łańcuchem Markowa* (*PZŁM*), jeżeli istnieją macierze $\mathbf{\Delta} = (\delta_{ij})_{i,j\in S}$, $\mathbf{D} = (d_{ij})_{i,j\in S}$ takie, że dla dowolnych $i, j \in S$, $i \neq j$, $\delta_{ij} \geq 0$, $d_{ij} \in \mathbb{R}\cup\{\infty\}$ oraz

$$-l_{ij}(\varepsilon) \sim \delta_{ij}\varepsilon^{d_{ij}}.$$

Rodzinę nieujemnych wektorów u-wymiarowych $\{\mathbf{b}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ nazywać będziemy *potęgowo zaburzonym nieujemnym wektorem* (*PZNW*), jeżeli istnieją wektory $\boldsymbol{\zeta} = (\zeta_i)_{i=1}^u$, $\mathbf{z} = (z_i)_{i=1}^u$ takie, że dla dowolnego $i = 1,\ldots,u$, $\zeta_i \geq 0$, $z_i \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ oraz

$$b_i(\varepsilon) \sim \zeta_i\varepsilon^{z_i}.$$

W dalszej części utożsamiać będziemy *PZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ z macierzami $\mathbf{\Delta}$ i $\mathbf{D}$, natomiast *PZNW* $\{\mathbf{b}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ — z wektorami $\boldsymbol{\zeta}$ i $\mathbf{z}$.

Przykład 4.1. Najczęściej spotykanymi w literaturze przykładami rodziny *PZŁM* są:

(1) liniowo zaburzone *ŁM* (patrz np. [AbBiFi], [BiFi], [HasHav], [HavRi], [Sch 1–3])

$$\mathbf{L}(\varepsilon) = \mathbf{L}_0 + \varepsilon\mathbf{L}_1,$$

gdzie $\mathbf{L}_0$ i $\mathbf{L}_1$ są laplasjanami Markowa;

(2) wielomianowo lub analitycznie zaburzone *ŁM* (patrz np. [HasHav], [RoWi 1–2])

$$\mathbf{L}(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{N} \varepsilon^n \mathbf{L}_n,$$

gdzie każdy $\mathbf{L}_n$ jest laplasjanem Markowa, $N \leq \infty$.

Przyjmijmy

$$g(\mathbf{\Delta}) := (S, \{(i,j) \in S \times S :\ \delta_{ij} \neq 0\}) \quad \text{oraz}$$
$$g^*(\mathbf{D}) := (S, \{(i,j) \in S \times S :\ d_{ij} < \infty\}).$$

Łatwo zauważyć, że dla dostatecznie małych ε, $g(\mathbf{L}(\varepsilon)) = g(\mathbf{\Delta}) = g^*(\mathbf{D})$.

Stąd i ze stwierdzeń 2.3–2.5 otrzymujemy następujące stwierdzenia.

Stwierdzenie 4.1. *Niech dany będzie PZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *określony przez macierze* $\mathbf{\Delta}$ *i* $\mathbf{D}$*. Wtedy następujące warunki są równoważne.*

(1) *Istnieje* $\varepsilon_0 \in (0,\varepsilon_1)$ *takie, że dla dowolnego* $\varepsilon \in (0,\varepsilon_0)$*, laplasjan* $\mathbf{L}(\varepsilon)$ *jest nieprzywiedlny (jednoklasowy).*

(2) *Macierz* $\mathbf{\Delta}$ *jest nieprzywiedlna (jednoklasowa).*

(3) *Graf* $g^*(\mathbf{D})$ *jest silnie (słabo) spójny.*

PZŁM $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ spełniający jeden z warunków stwierdzenia 4.1 nazywać będziemy *nieprzywiedlnym* (*jednoklasowym*) *PZŁM.*

Stwierdzenie 4.2. *Niech dany będzie zbiór* $R \subset S$ *oraz PZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *określony przez macierze* $\mathbf{\Delta}$ *i* $\mathbf{D}$*. Wtedy następujące warunki są równoważne.*

(1) *Istnieje* $\varepsilon_0 \in (0,\varepsilon_1)$ *takie, że dla dowolnego* $\varepsilon \in (0,\varepsilon_0)$*, macierz* $\mathbf{L}(R|R)(\varepsilon)$ *jest nieosobliwa.*

(2) *Istnieje* $\varepsilon_0 \in (0,\varepsilon_1)$ *takie, że dla dowolnego* $\varepsilon \in (0,\varepsilon_0)$*, w grafie* $g(\mathbf{L}(\varepsilon))$ *istnieje las o korzeniu* R*.*

(3) *W grafie* $g^*(\mathbf{D})$ *istnieje las o korzeniu* R*.*

Stwierdzenie 4.3. *Niech dany będzie podział zbioru* $S = C_1 \dot\cup \ldots \dot\cup C_m \dot\cup T$*,* $m \geq 1$ *oraz PZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *określony przez macierze* $\mathbf{\Delta}$ *i* $\mathbf{D}$*. Wtedy następujące warunki są równoważne.*

(1) *Istnieje* $\varepsilon_0 \in (0,\varepsilon_1)$ *takie, że dla dowolnego* $\varepsilon \in (0,\varepsilon_0)$*, zbiory* $C_1,\ldots,C_m$ *są wszystkimi klasami powracającymi, a zbiór* T *jest zbiorem stanów chwilowych w ŁM o laplasjanie* $\mathbf{L}(\varepsilon)$*.*

(2) *Zbiory* $C_1,\ldots,C_m$ *są wszystkimi klasami zamkniętymi, a zbiór* T *jest zbiorem stanów nieistotnych w grafie* $g^*(\mathbf{D})$*.*

Niech f będzie lasem zawartym w $g^*(\mathbf{D})$ oraz F — rodziną lasów zawartych w $g^*(\mathbf{D})$. Zdefiniujemy teraz podstawowe parametry *PZŁM*

$$d(f) := \sum_{(i,j)\in f} d_{ij}, \qquad \delta(f) := \prod_{(i,j)\in f} \delta_{ij},$$

$$d(F) := \min_{f\in F} d(f), \qquad \delta(F) := \sum_{f\in F:\, d(f)=d(F)} \delta(f).$$

Przyjmiemy dla wygody

$$d(R) := d(F(R)), \qquad \delta(R) := \delta(F(R));$$

dla $i \notin R$, $j \in R$

$$d_{ij}(R) := d(F_{ij}(R)), \qquad \delta_{ij}(R) := \delta(F_{ij}(R));$$

dla $i, j \notin R$

$$d_{ij}(R, j) := d_{ij}(R \cup \{j\}), \qquad \delta_{ij}(R, j) := \delta_{ij}(R \cup \{j\});$$

dla $i \in S$

$$\begin{aligned} &d(i) := d(\{i\}), \qquad \delta(i) := \delta(\{i\}), \\ &n := \min_{j \in S} d(j), \qquad \nu := \sum_{j:\, d(j)=n} \delta(j) \quad \text{oraz} \\ &h_i := d(i) - n, \qquad \eta_i := \delta(i)/\nu. \end{aligned}$$

Niech ponadto $w(f)(\varepsilon)$ oraz $w(F)(\varepsilon)$ oznaczają wagi lasu oraz zbioru lasów w grafie $g(L(\varepsilon))$.

Bezpośrednio z lematu 4.3 otrzymujemy następujące stwierdzenie.

Stwierdzenie 4.4. *Niech dany będzie PZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0, \varepsilon_1)\}$ *okeślony przez macierze* $\mathbf{\Delta}$ *i* $\mathbf{D}$. *Niech* f *będzie lasem oraz* F *— zbiorem lasów w grafie* $g^*(\mathbf{D})$. *Wtedy:*

(1) $w(f)(\varepsilon) \sim \delta(f)\varepsilon^{d(f)}$;
(2) $w(F)(\varepsilon) \sim \delta(F)\varepsilon^{d(F)}$.

Twierdzenie 4.1. *Niech dany będzie zbiór* $R \subseteq S$ *oraz PZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0, \varepsilon_1)\}$ *określony przez macierze* $\mathbf{\Delta}$ *i* $\mathbf{D}$. *Niech ponadto dany będzie PZNW* $\{\mathbf{b}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0, \varepsilon_1)\}$ *określony przez wektory* $\boldsymbol{\zeta}$ *i* $\mathbf{z}$ *rzędu* $u := s - |R|$. *Załóżmy, że w grafie* $g^*(\mathbf{D})$ *istnieje las o korzeniu* R. *Wtedy:*

(1) *macierze* $\mathbf{L}(R\big|R)(\varepsilon)$ *są odwracalne dla dostatecznie małych* ε;
(2) *rozwiązanie* $\mathbf{x}(\varepsilon) = (x_i(\varepsilon))_{i \in S \setminus R}$ *układu równań liniowych*

$$\mathbf{L}(R\big|R)(\varepsilon)\mathbf{x}(\varepsilon) = \mathbf{b}(\varepsilon)$$

spełnia dla $i \in S \setminus R$ *relacje*

$$x_i(\varepsilon) \sim \alpha_i \varepsilon^{a_i},$$

gdzie współczynniki α_i *oraz* a_i *są zdefiniowane w dowodzie;*

(3) *rozwiązanie* $\mathbf{x}(\varepsilon) = (x_i(\varepsilon))_{i \in S \setminus R}$ *układu równań liniowych*

$$\mathbf{L}^T(R|R)(\varepsilon)\mathbf{x}(\varepsilon) = \mathbf{b}(\varepsilon)$$

spełnia dla $i \in S \setminus R$ *relacje*

$$x_i(\varepsilon) \sim \alpha_i \varepsilon^{a_i},$$

gdzie współczynniki α_i *oraz* a_i *są zdefiniowane w dowodzie.*

Dowód. Część (1) wynika ze stwierdzenia 4.2.

Dla dowodu części (2) zauważmy, że ze stwierdzenia 4.4 oraz lematów 4.1 (1) i (2) wynikają relacje dla $i \in S \setminus R$

$$\sum_{j \in S \setminus R} w_{ij}(R,j)(\varepsilon) b_j(\varepsilon) \sim \sum_{j \in S \setminus R} \delta_{ij}(R,j) \varepsilon^{d_{ij}(R,j)} \zeta_j \varepsilon^{z_j}$$
$$\sim \bar{\alpha}_i \varepsilon^{\bar{a}_i},$$

gdzie

$$\bar{a}_i := \min_{j \in S \setminus R} [d_{ij}(R,j) + z_j] \qquad \text{oraz}$$
$$\bar{\alpha}_i := \sum_{j \in S \setminus R:\, d_{ij}(R,j) + z_j = \bar{a}_i} \delta_{ij}(R,j) \zeta_j.$$

Stąd i z lematu 2.3 wynika, że dla $i \in S \setminus R$, $x_i(\varepsilon) \sim \alpha_i \varepsilon^{a_i}$, gdzie

$$a_i := \bar{a}_i - d(R) \quad \text{oraz} \quad \alpha_i := \bar{\alpha}_i / \delta(R).$$

Dla dowodu części (3) niech $\mathbf{L}_R(\varepsilon) := (l_{ij}(\varepsilon))_{i,j=1}^{u+1}$ będzie macierzą taką, że

$$\mathbf{L}_R(\varepsilon) := \begin{bmatrix} \mathbf{L}^T(R|R)(\varepsilon) & -\mathbf{b}(\varepsilon) \\ \mathbf{l}_R^T(\varepsilon) & b(\varepsilon) \end{bmatrix}, \tag{4.1}$$

gdzie $l_{iR} := \sum_{j \in R} l_{ij}(\varepsilon)$ dla $i = 1, \ldots, u$ oraz $b(\varepsilon) := \sum_{j=1}^{u} b_j(\varepsilon)$.

Niech ponadto $\mathbf{D}_R := (d_{ij})_{i,j=1}^{u+1}$, $\mathbf{\Delta}_R := (\delta_{ij})_{i,j=1}^{u+1}$ będą macierzami takimi, że

$$\mathbf{D}_R = \begin{bmatrix} \mathbf{D}^T(R|R) & \mathbf{z} \\ \mathbf{d}_R^T & z \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{\Delta}_R = \begin{bmatrix} \mathbf{\Delta}^T(R|R) & \boldsymbol{\zeta} \\ \boldsymbol{\delta}_R^T & \zeta \end{bmatrix},$$

gdzie

$$\mathbf{d}_R^T := (d_{1R}, \dots, d_{uR}), \quad d_{iR} := \min_{j \in R} d_{ij},$$

$$\boldsymbol{\delta}_R^T := (\delta_{1R}, \dots, \delta_{uR}), \quad \delta_{iR} := \sum_{j \in R} \delta_{ij} \mathbf{1}(d_{ij} = d_{iR})$$

dla $i = 1, \dots, u$ oraz

$$z := \min_{j \le u} z_j, \quad \zeta := -\sum_{j=1}^{u} \zeta_j \mathbf{1}(z_j = z).$$

Oczywiście

$$-l_{ij}(\varepsilon) \sim \delta_{ij} \varepsilon^{d_{ij}} \quad \text{dla } i, j = 1, \dots, u+1,\ i \neq j.$$

Ze stwierdzenia 4.4 wynika, że w grafie $g(\mathbf{L}_R(\varepsilon))$ dla $i = 1, \dots, u+1$

$$w(i) \sim \delta(i) \varepsilon^{d(i)}.$$

Stąd oraz z wniosku 2.2 (2) otrzymujemy dla $i = 1, \dots, u+1$

$$x_i(\varepsilon) \sim \alpha_i \varepsilon^{a_i}, \quad \text{gdzie}$$

$$a_i := d(i) - d(u+1), \quad \text{oraz}$$

$$\alpha_i := \delta(i)/\delta(u+1).$$

□

Twierdzenie 4.2. *Niech dany będzie jednoklasowy PZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0, \varepsilon_1)\}$ *określony przez macierze* $\boldsymbol{\Delta}$ *i* $\mathbf{D}$. *Wtedy*

$$\pi_i(\varepsilon) \sim \eta_i \varepsilon^{h_i}.$$

Dowód. Ze stwierdzenia 4.4 oraz lematu 4.3 (1) wynika, że

$$\sum_{j \in S} w(j)(\varepsilon) \sim \nu \varepsilon^n.$$

W rezultacie z twierdzenia 2.1 (2) (a) oraz lematu 4.3 (3) otrzymujemy

$$\pi_i(\varepsilon) = \frac{w(i)(\varepsilon)}{\sum_{j \in S} w(j)(\varepsilon)} \sim \eta_i \varepsilon^{h_i}.$$

□

Twierdzenie 4.3. *Niech dany będzie PZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *określony przez macierze* $\mathbf{\Delta}$ *i* $\mathbf{D}$ *składający się z* $m \geq 1$ *klas powracających* C_k, $k \leq m$ *oraz zbioru stanów chwilowych* T. *Przyjmijmy* $C := C_1 \dot\cup \ldots \dot\cup C_m$. *Wtedy:*

(1) $p^*_{ij}(\varepsilon) \sim \eta^k_j \varepsilon^{h^k_j}$, *jeśli* $i,j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$;
(2) $p^*_{ij}(\varepsilon) \sim \gamma^k_i \eta^k_j \varepsilon^{c^k_i + h^k_j}$, *jeśli* $i \in T$ *oraz* $j \in C_k$ *dla pewnego* $k \leq m$;
(3) $p^*_{ij}(\varepsilon) = 0$ *w pozostałych przypadkach,*

gdzie współczynniki $\eta^k_j, h^k_j, \gamma^k_i, c^k_i$ *zdefiniowane są w dowodzie.*

Dowód. Część (3) wynika z twierdzenia 2.3 (3). Część (1) wynika z twierdzenia 2.3 (1) oraz twierdzenia 4.2. Współczynniki η^k_j, h^k_j definiujemy jak w dowodzie twierdzenia 4.2.

Dla dowodu części (2) zauważmy, że dla $i \in T$

$$\sum_{l \in C_k} w_{il}(C)(\varepsilon) \sim \bar\gamma^k_i \varepsilon^{\bar c^k_i},$$

gdzie $\bar c^k_i := \min_{l \in C_k} d_{il}(C)$ oraz

$$\bar\gamma^k_i := \sum_{l \in C_k:\, d_{il}(C) = \bar c^k_i} \delta_{il}(C).$$

Stąd i z twierdzenia 2.4 (2) otrzymujemy

$$\sum_{l \in C_k} p_{il}(C) = \frac{\sum_{l \in C_k} w_{il}(C)(\varepsilon)}{w(C)} \sim \gamma^k_i \varepsilon^{c^k_i},$$

gdzie $c^k_i := \bar c^k_i - d(C)$ oraz $\gamma^k_i := \bar\gamma^k_i / \delta(C)$.

W rezultacie z uwagi 2.4 (1) oraz udowodnionej części (1) wynika teza. □

Twierdzenie 4.4. *Niech dany będzie PZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ *określony przez macierze* $\mathbf{\Delta}$ *i* $\mathbf{D}$, *dla którego przy ustalonym* $R \subseteq S$, *w grafie* $g^*(\mathbf{D})$ *istnieje las o korzeniu* R. *Wtedy dla* $i,j \in S \setminus R$, $k \in R$:

(1) $\mu_{ij}(R)(\varepsilon) \sim \alpha_{ijR} \varepsilon^{a_{ijR}}$;
(2) $p_{ik}(R)(\varepsilon) \sim \gamma_{ikR} \varepsilon^{c_{ikR}}$;
(3) $m_i(R)(\varepsilon) \sim \beta_{iR} \varepsilon^{b_{iR}}$;

gdzie współczynniki α_{ijR}, a_{ijR}, β_{iR}, b_{iR}, γ_{ikR}, c_{ikR} *są zdefiniowane w dowodzie.*

Dowód. Z lematu 4.3 (1) wynika, że $\sum_{j\notin R} w_{ij}(R,j)(\varepsilon) \sim \bar{\beta}_{iR}\varepsilon^{\bar{b}_{iR}}$, gdzie

$$\bar{b}_{iR} := \min_{j\notin R} d_{ij}(R,j) \quad \text{oraz} \quad \bar{\beta}_{iR} := \sum_{j\notin R:\, d_{ij}(R,j)=\bar{b}_{iR}} \delta_{ij}(R,j).$$

W rezultacie dla $i,j \in S\setminus R$, $k\in R$ z twierdzenia 2.4 otrzymujemy

$$\begin{aligned} v_{ij}(R)(\varepsilon) &= \frac{w_{ij}(R,j)(\varepsilon)}{w(R)(\varepsilon)} \sim \alpha_{ijR}\varepsilon^{a_{ijR}},\\ p_{ik}(R)(\varepsilon) &= \frac{w_{ik}(R)(\varepsilon)}{w(R)(\varepsilon)} \sim \gamma_{ikR}\varepsilon^{c_{ikR}},\\ m_i(R)(\varepsilon) &= \frac{\sum_{j\notin R} w_{ij}(R,j)(\varepsilon)}{w(R)(\varepsilon)} \sim \beta_{iR}\varepsilon^{b_{iR}}, \end{aligned}$$

gdzie

$$\begin{aligned} a_{ijR} &:= d_{ij}(R,j) - d(R), & \alpha_{ijR} &:= \frac{\delta_{ij}(R,j)}{\delta(R)},\\ c_{ikR} &:= d_{ik}(R) - d(R), & \gamma_{ikR} &:= \frac{\delta_{ik}(R)}{\delta(R)},\\ b_{iR} &:= \bar{b}_{iR} - d(R), & \beta_{iR} &:= \frac{\bar{\beta}_{iR}}{\delta(R)}. \end{aligned}$$

□

Uwagi 4.1.

(1) Twierdzenia 4.2 i 4.4 są podobne do wyników Freidlina i Wentzlla [FreWe 1–2] oraz Hwanga i Sheu ([HwSh 1–2]) , gdzie rozważana jest większa rodzina zaburzonych łańcuchów Markowa niż *PZŁM*. Jednak tezy są tam mniej dokładne.

(2) W pracach [AbBiFi], [BiFi] i [BiSt] rozważano problem ergodycznego sterowania liniowo zaburzonym *ŁM*. W dowodach wykorzystano rezultaty klasycznej teorii zaburzeń operatorów liniowych [Kat].

4.2. **Algorytmy.**

Niech dany będzie *PZŁM* $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ indukowany przez znane macierze $\boldsymbol{\Delta}$ i $\mathbf{D}$. Załóżmy, że dla danego $R \subset S$, w grafie $g^*(\mathbf{D})$ istnieje las o korzeniu R. Niech ponadto dany będzie *PZNW* $\{\mathbf{b}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ rzędu $u := s - |R|$ indukowany przez znane wektory $\boldsymbol{\zeta}$ i $\mathbf{z}$.

Zauważmy, że obliczenie współczynników $\boldsymbol{\alpha}$ i $\mathbf{a}$ rozwiązania układów

$$\mathbf{L}^T(R\big|R)(\varepsilon)\mathbf{x}(\varepsilon) = \mathbf{b}(\varepsilon) \qquad \text{lub} \tag{4.2}$$

$$\mathbf{L}(R\big|R)(\varepsilon)\mathbf{x}(\varepsilon) = \mathbf{b}(\varepsilon) \tag{4.3}$$

z definicji podanej w dowodzie twierdzenia 4.1 nie są efektywne. Celem tego rozdziału będzie zatem konstrukcja i analiza algorytmów obliczających wektory $\mathbf{a}, \boldsymbol{\alpha}$ dla układu (4.2) lub (4.3).

Oznaczmy

$$\mathbf{d}_R^T := (d_{1R}, \ldots, d_{uR}), \quad d_{iR} := \min_{j\in R} d_{ij},$$

$$\boldsymbol{\delta}_R^T := (\delta_{1R}, \ldots, \delta_{uR}), \quad \delta_{iR} := \sum_{j\in R} \delta_{ij}\mathbf{1}(d_{ij} = d_{iR})$$

dla $i = 1, \ldots, u$.

Algorytmy 4.1 i 4.2 są uogólnieniem algorytmów 3.1 i 3.2 dla problemów (4.2) i (4.3).

Algorytm 4.1.

input: Macierze $\boldsymbol{\Delta}(R\big|R)$, $\mathbf{D}(R\big|R)$ bez elementów diagonalnych, wektory $\boldsymbol{\delta}_R$, $\mathbf{d}_R$, $\boldsymbol{\zeta}$, $\mathbf{z}$.
output: Wektory $\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{a}$.
begin
1) for $k = 1$ **to** u **do begin**
$d_{k,u+1} := d_{kR}$**;** $\delta_{k,u+1} := \delta_{kR}$**;**
$d_{u+1,k} := z_k$**;** $\delta_{u+1,k} := \zeta_k$**;**
end;
2) **{** Eliminacja **}**
for $k = 1$ **to** u **do begin**
$d_k := \min_{k<j\le u+1} d_{jk}$**;**

$\delta_k := \sum_{j=k+1}^{u+1} \delta_{jk}\mathbf{1}(d_{jk} = d_k)$**;**
for $i, j = k+1,\ i \neq j$ **to** $u+1$ **do begin**
$d := d_{ij} \wedge (d_{ik} + d_{kj} - d_k)$**;**
$\delta_{ij} := \delta_{ij}\mathbf{1}(d_{ij} = d) + (\delta_{ik}\delta_{kj}/\delta_k)\mathbf{1}(d_{ik} + d_{kj} - d_k = d)$**;**
$d_{ij} := d$
end;
end;
3) **{** Podstawienie wstecz **}**
for $k = u$ **downto** 1 **do begin**

$$a_k := \left[d_{u+1,k} \wedge \min_{k<j\leq u} (d_{kj} + a_j) \right] - d_k;$$

$$\alpha_k := \left[\delta_{u+1,k}\mathbf{1}(d_{u+1,k} = a_k) + \sum_{j=k+1}^{u} \delta_{kj}\alpha_j \mathbf{1}(d_{kj} + a_j = a_k) \right] / \delta_k$$

end
end.

Algorytm 4.2.

input: Macierze $\mathbf{\Delta}(R|R)$, $\mathbf{D}(R|R)$ bez elementów diagonalnych, wektory $\boldsymbol{\delta}_R$, $\mathbf{d}_R$, $\boldsymbol{\zeta}$, $\mathbf{z}$.
output: Wektory $\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{a}$.
begin
1) **for** $k = 1$ **to** u **do begin**
$d_{k,u+1} := d_{kR}$**;** $\delta_{k,u+1} := \delta_{kR}$**;**
$d_{k,u+2} := z_k$**;** $\delta_{k,u+2} := \zeta_k$**;**
end;
2) **{** Eliminacja **}**
for $k = 1$ **to** u **do begin**
$d_k := \min_{k<j\leq u+1} d_{jk}$**;**
$\delta_k := \sum_{j=k+1}^{u+1} \delta_{jk}\mathbf{1}(d_{jk} = d_k)$**;**
for $i, j = k+1,\ i \neq j$ **to** $i = u$**,** $j = u+2$ **do begin**
$d := d_{ij} \wedge (d_{ik} + d_{kj} - d_k)$**;**
$\delta_{ij} := \delta_{ij}\mathbf{1}(d_{ij} = d) + (\delta_{ik}\delta_{kj}/\delta_k)\mathbf{1}(d_{ik} + d_{kj} - d_k = d)$**;**
$d_{ij} := d$

end;

end;

3) **{** Podstawienie wstecz **}**

for $k = u$ **downto** 1 **do begin**

$$a_k := \left[d_{u+1,k} \wedge \min_{k<j\le u} (d_{jk} + a_j) \right] - d_k;$$

$$\alpha_k := \left[\delta_{k,u+2} \mathbf{1}(d_{k,u+2} = a_k) + \sum_{j=k+1}^{u} \delta_{jk}\alpha_j \mathbf{1}(d_{jk} + a_j = a_k) \right] / \delta_k$$

end

end.

Kolejne cztery algorytmy grupują iteracyjnie stany *ŁM* należące do tej samej klasy zamkniętej w pewnych grafach zależnych od $\mathbf{D}$, a następnie rozwiązują układy równań liniowych ograniczone do poszczególnych klas. Algorytmy 4.3 i 4.4 rozwiązują problem (4.2), natomiast algorytmy 4.5 i 4.6 — problem (4.3). Algorytmy 4.4 i 4.6 różnią się od algorytmów 4.3 i 4.5 sposobem normalizacji wyniku: zamiast jednej normalizacji na końcu, wykonują one pośrednie normalizacje na każdym etapie agregacji. Nie zwiększa to kosztu obliczeń, natomiast zabezpiecza przed występowaniem niedomiaru.

Algorytm 4.3.

input: Macierze $\boldsymbol{\Delta}(R|R)$, $\mathbf{D}(R|R)$ bez elementów diagonalnych, wektory $\boldsymbol{\delta}_R$, $\mathbf{d}_R$, $\boldsymbol{\zeta}$, $\mathbf{z}$, liczba $\varepsilon_0 \in (0, \varepsilon_1)$.

output: Wektory $\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{a}$.

begin

1) for $k = 1$ **to** u **do begin**

$d_{k,u+1} := d_{kR}$**;** $\delta_{k,u+1} := \delta_{kR}$**;**

$d_{u+1,k} := z_k$**;** $\delta_{u+1,k} := \zeta_k$**;**

end;

2) **{** W tej części algorytm hierarchicznie agreguje graf indukowany przez macierz $(d_{ij})_{i,j=1}^{u+1}$,

$i \neq j$. Zmienna k indeksuje etapy agregacji czyli kolejne iteracje w pętli "repeat".

(S^k, E^k) jest grafem indukowanym przez zgrupowany *ŁM* na k-tym etapie agregacji. **}**

$k := 0$; $S^0 := \{\{i\} : i = 1, \ldots, u+1\}$; $E^0 := \emptyset$;
for $\{i\} \in S^0$ **do begin**
  for $\{j\} \in S^0$, $j \neq i$ **do begin**
    $\delta(\{i\}, \{j\}) := \delta_{ij}$; $d(\{i\}, \{j\}) := d_{ij}$;
  end;
  $V(\{i\}) := \min_{\substack{\{l\} \in S^0 \\ l \neq i}} d_{il}$;
  $d_i := 0$; $\delta_i := 1$;
  for $j \in \arg\min_{\substack{\{l\} \in S^0 \\ l \neq i}} d_{il}$ **do** $E^0 \cup \{(\{i\}, \{j\})\}$
end;
repeat
  Znajdź (np. za pomocą algorytmu 2.1) podział zbioru S^k na klasy zamknięte i zbiór stanów nieistotnych w grafie (S^k, E^k);
  $k := k + 1$; $E^k := \emptyset$;
  $S^k := \{I^k :$ I^k jest sumą wszystkich stanów należących do tej samej klasy zamkniętej albo stanem nieistotnym w grafie $(S^{k-1}, E^{k-1})\}$;
  for $I^k \in S^k$ **do begin**
    for $I^{k-1}, J^{k-1} \subseteq I^k$, $I^{k-1} \neq J^{k-1}$ **do**
      if $(I^{k-1}, J^{k-1}) \in E^{k-1}$ **then**
        $l_{I^{k-1}, J^{k-1}} := -\delta(I^{k-1}, J^{k-1})\varepsilon_0^{d(I^{k-1}, J^{k-1})}$
      else $l_{I^{k-1}, J^{k-1}} := 0$;
    Rozwiąż (np. za pomocą algorytmu 3.1) równanie $\mathbf{L}^T_{I_1^{k-1}, I_1^{k-1}} \mathbf{a}_{I_1^{k-1}} = -\mathbf{l}_{I_1^{k-1}})$ dla pewnego $I_1^{k-1} \subseteq I^k$;
      { $\mathbf{a}_{I_1^{k-1}} := (a_{I^{k-1}})_{I^{k-1} \subseteq I^k,\, I^{k-1} \neq I_1^{k-1}}$ oraz
        $\mathbf{l}_{I_1^{k-1}} := (l_{I_1^{k-1}, I^{k-1}})_{I^{k-1} \subseteq I^k,\, I^{k-1} \neq I_1^{k-1}}$ }
    Oblicz $\det \mathbf{L}^T_{I_1^{k-1}, I_1^{k-1}}$;
      $a_{I_1^{k-1}} := 1$;
      $\sigma(I^k) := \sum_{I^{k-1} \subseteq I^k} V(I^{k-1})$;
    for $I^{k-1} \subseteq I^k$ **do begin**
      $d(I^{k-1}) := \sigma(I^k) - V(I^{k-1})$;
      $\delta(I^{k-1}) := a_{I^{k-1}} \det \mathbf{L}^T_{I_1^{k-1}, I_1^{k-1}} \varepsilon_0^{-d(I^{k-1})}$;
      for $i \in I^{k-1}$ **do begin**

$d_i := d_i + d(I^{k-1})$**;**
$\delta_i := \delta_i \delta(I^{k-1})$

{ Współczynniki d_i obliczone na k–tym etapie agregacji są "długościami" najkrótszych drzew o korzeniu i, w grafie wejściowym obciętym do I^k. W następnej pętli "for" obliczamy "długości" $d(I^k, J^k)$ najkrótszych drzew o korzeniu $j \in J^k$ oraz dziedzinie $I^k \cup \{j\}$. **}**

end
end;
for $J^k \in S^k$**,** $J^k \neq I^k$ **do**

$$d(I^k, J^k) := \min_{\substack{I^{k-1} \subseteq I^k \\ J^{k-1} \subseteq J^k}} [d(I^{k-1}) + d(I^{k-1}, J^{k-1})];$$

$V(I^k) := \min_{\substack{J^k \in S^k \\ J^k \neq I^k}} d(I^k, J^k)$**;**
for $J^k \in \arg\min_{\substack{J_0^k \in S^k \\ J_0^k \neq I^k}} d(I^k, J_0^k)$ **do begin**

$E^k := E^k \cup \{(I^k, J^k)\}$**;**

$$\delta(I^k, J^k) := \sum_{(I^{k-1}, J^{k-1}) \in \arg\min \limits_{\substack{I_0^{k-1} \subseteq I^k \\ J_0^{k-1} \subseteq J^k}} [d(I_0^{k-1}) + d(I_0^{k-1}, J_0^{k-1})]} \delta(I^{k-1}) \delta(I^{k-1}, J^{k-1})$$

end
end
until w grafie $|S^k| = 1$ istnieje tylko jedna klasa zamknięta**;**

3) **{** Normalizacja **}**
for $i = 1$ **to** u **do begin**
$a_i := d_i - d_{u+1}$**;**
$\alpha_i := \delta_i / \delta_{u+1}$**;**
end
end.

Algorytm 4.4.

input: Macierze $\boldsymbol{\Delta}(R|R)$, $\mathbf{D}(R|R)$ bez elementów diagonalnych, wektory $\boldsymbol{\delta}_R$, $\mathbf{d}_R$, $\boldsymbol{\zeta}$, $\mathbf{z}$, liczba $\varepsilon_0 \in (0, \varepsilon_1)$
output: Wektory $\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{a}$.

begin

1) for $k = 1$ **to** u **do begin**

$d_{k,u+1} := d_{kR}$**;** $\delta_{k,u+1} := \delta_{kR}$**;**

$d_{u+1,k} := z_k$**;** $\delta_{u+1,k} := \zeta_k$**;**

end;

2) **{** W tej części algorytm hierarchicznie agreguje graf indukowany przez macierz $(d_{ij})_{i,j=1}^{u+1}$,

$i \neq j$. Zmienna k indeksuje etapy agregacji czyli kolejne iteracje w pętli "repeat".

(S^k, E^k) jest grafem indukowanym przez zgrupowany $\L M$ na k-tym etapie agregacji.

}

$k := 0$**;** $S^0 := \{\{i\} : i = 1, \ldots, u+1\}$**;** $E^0 := \emptyset$**;**

for $\{i\} \in S^0$ **do begin**

for $\{j\} \in S^0$**,** $j \neq i$ **do begin**

$\bar{\delta}(\{i\}, \{j\}) := \delta_{ij}$**;** $\bar{d}(\{i\}, \{j\}) := d_{ij}$**;**

end;

$\bar{V}(\{i\}) := \min_{\substack{\{l\} \in S^0 \\ l \neq i}} d_{il}$**;**

$h_i := 0$**;** $\eta_i := 1$**;**

for $j \in \arg\min_{\substack{\{l\} \in S^0 \\ l \neq i}} d_{il}$ **do** $E^0 \cup \{(\{i\}, \{j\})\}$

end;

repeat

Znajdź (np. za pomocą algorytmu 2.1) podział zbioru S^k na klasy zamknięte i zbiór stanów nieistotnych w grafie (S^k, E^k)**;**

$k := k + 1$**;** $E^k := \emptyset$**;**

$S^k := \{I^k :$ I^k jest sumą wszystkich stanów należących do tej samej klasy zamkniętej albo stanem nieistotnym w grafie $(S^{k-1}, E^{k-1})\}$**;**

for $I^k \in S^k$ **do begin**

for $I^{k-1}, J^{k-1} \subseteq I^k$**,** $I^{k-1} \neq J^{k-1}$ **do**

if $(I^{k-1}, J^{k-1}) \in E^{k-1}$ **then**

$\bar{l}_{I^{k-1}, J^{k-1}} := -\bar{\delta}(I^{k-1}, J^{k-1}) \varepsilon_0^{\bar{d}(I^{k-1}, J^{k-1})}$

else $\bar{l}_{I^{k-1}, J^{k-1}} := 0$**;**

Rozwiąż (np. za pomocą algorytmu 3.1) równanie

$\bar{\mathbf{L}}^T_{I_1^{k-1}, I_1^{k-1}} \bar{\mathbf{a}}_{I_1^{k-1}} = -\bar{\mathbf{l}}_{I_1^{k-1}}$, gdzie $I_1^{k-1} \subseteq I^k$,

$$\{ \quad \bar{\mathbf{a}}_{I_1^{k-1}} := (\bar{a}_{I^{k-1}})_{I^{k-1}\subseteq I^k,\, I^{k-1}\neq I_1^{k-1}} \quad \text{oraz}$$
$$\bar{\mathbf{l}}_{I_1^{k-1}} := (\bar{l}_{I_1^{k-1},I^{k-1}})_{I^{k-1}\subseteq I^k,\, I^{k-1}\neq I_1^{k-1}} \quad \}$$

$\bar{a}_{I_1^{k-1}} := 1;$

$v(I^k) := \max\limits_{I^{k-1}\subseteq I^k} \bar{V}(I^{k-1});$

$$\bar{\nu}(I^k)(\varepsilon_0) := \sum_{I^{k-1}\in \arg\max_{I_0^{k-1}\subseteq I^k} \bar{V}(I_0^{k-1})} \bar{a}_{I^{k-1}};$$

for $I^{k-1} \subseteq I^k$ **do begin**

$h(I^{k-1}) := v(I^k) - \bar{V}(I^{k-1});$

$\eta(I^{k-1}) := \bar{a}_{I^{k-1}} \varepsilon_0^{-h(I^{k-1})} / \bar{\nu}(I^k);$

for $i \in I^{k-1}$ **do begin**

$h_i := h_i + h(I^{k-1});$

$\eta_i := \eta_i \eta(I^{k-1})$

{ Współczynniki h_i obliczone na k–tym etapie agregacji są "wysokościami" stanów w wejściowym grafie obciętym do I^k. W następnej pętli "for" obliczamy "odległości" $\bar{d}(I^k, J^k)$ między stanami zgrupowanymi na k–tym etapie agregacji. $\bar{V}(I^k)$ jest "objętością" klasy zamkniętej I^k, czyli odległością między najniższym (względem h_i) stanem w klasie a najbliższym sąsiadem poza klasą. }

end

end;

for $J^k \in S^k$, $J^k \neq I^k$ **do**

$$\bar{d}(I^k, J^k) := \min_{\substack{I^{k-1}\subseteq I^k \\ J^{k-1}\subseteq J^k}} [h(I^{k-1}) + \bar{d}(I^{k-1}, J^{k-1})];$$

$\bar{V}(I^k) := \min_{\substack{J^k\in S^k \\ J^k\neq I^k}} \bar{d}(I^k, J^k);$

for $J^k \in \arg\min_{\substack{J_0^k\in S^k \\ J_0^k\neq I^k}} d(I^k, J_0^k)$ **do begin**

$E^k := E^k \cup \{(I^k, J^k)\};$

$$\bar{\delta}(I^k, J^k) := \sum_{(I^{k-1},J^{k-1})\in \arg\min_{\substack{I_0^{k-1}\subseteq I^k \\ J_0^{k-1}\subseteq J^k}} [h(I_0^{k-1})+\bar{d}(I_0^{k-1},J_0^{k-1})]} \eta(I^{k-1})\bar{\delta}(I^{k-1}, J^{k-1})$$

end
end
until w grafie $|S^k| = 1$ istnieje tylko jedna klasa zamknięta**;**
3) **{** Normalizacja **}**
for $i = 1$ **to** u **do begin**
$a_i := h_i - h_{u+1}$**;**
$\alpha_i := \eta_i / \eta_{u+1}$**;**
end
end.

Algorytm 4.5.

input: Macierze $\mathbf{\Delta}(R|R)$, $\mathbf{D}(R|R)$ bez elementów diagonalnych, wektory $\boldsymbol{\delta}_R$, $\mathbf{d}_R$, $\boldsymbol{\zeta}$, $\mathbf{z}$, liczba $\varepsilon_0 \in (0, \varepsilon_1)$
output: Wektory $\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{a}$.
begin
1) **for** $k = 1$ **to** u **do begin**
$d_{k,u+1} := d_{kR}$**;** $\delta_{k,u+1} := \delta_{kR}$**;**
$d_{k,u+2} := z_k$**;** $\delta_{k,u+2} := \zeta_k$**;**
end;
2) $k := 0$**;** $S^0 := \{\{i\} : i = 1, \ldots, u+1\}$**;** $E^0 := \emptyset$**;**

{ Część 2) jest hierarchiczną agregacją grafu wyznaczonego przez macierz $(d_{ij})_{i,j=1}^{u+1}$, $i \neq j$, bez krawędzi wychodzących z $u+1$. Grupujemy również krawędzie prowadzące do stanu $u+2$. Zmienna k ma podobne znaczenie jak w algorytmach 4.3 i 4.4. **}**

for $\{i\} \in S^0 \setminus \{\{u+1\}\}$ **do begin**
for $\{j\} \in S^0 \cup \{\{u+2\}\}$**,** $j \neq i$ **do begin**
$\delta(\{i\}, \{j\}) := \delta_{i,j}$**;** $d(\{i\}, \{j\}) := d_{ij}$**;**
end;
$V(\{i\}) := \min_{\substack{\{l\} \in S^0 \\ l \neq i}} d_{il}$**;**
for $j \in \arg\min_{\substack{\{l\} \in S^0 \\ l \neq i}} d_{il}$ **do** $E^k := E^k \cup \{(\{i\}, \{j\})\}$
end;

Znajdź (np. za pomocą algorytmu 2.1) podział zbioru S^0 na klasy zamknięte i zbiór stanów nieistotnych w grafie (S^0, E^0);

while W grafie (S^k, E^k) istnieją klasy zamknięte o mocy większej niż 1 **do begin**

$k := k + 1$; $E^k := \emptyset$;

$S^k := \{I^k :$ I^k jest sumą wszystkich stanów należących do tej samej klasy zamkniętej albo stanem nieistotnym w grafie $(S^{k-1}, E^{k-1})\}$;

for $I^k \in S^k \setminus \{u+1\}$ **do begin**

for $I^{k-1}, J^{k-1} \subseteq I^k$, $I^{k-1} \neq J^{k-1}$ **do**

if $(I^{k-1}, J^{k-1}) \in E^{k-1}$ **then**

$l_{I^{k-1},J^{k-1}} := -\delta(I^{k-1}, J^{k-1})\varepsilon_0^{d(I^{k-1},J^{k-1})}$

else $l_{I^{k-1},J^{k-1}} := 0$;

Rozwiąż (np. za pomocą algorytmu 3.1) równanie

$\mathbf{L}^T_{I_1^{k-1},I_1^{k-1}}\mathbf{a}_{I_1^{k-1}} = -\mathbf{l}_{I_1^{k-1}}$ dla pewnego $I_1^{k-1} \subseteq I^k$;

$\{ \quad \mathbf{a}_{I_1^{k-1}} := (a_{I^{k-1}})_{I^{k-1}\subseteq I^k,\, I^{k-1}\neq I_1^{k-1}}$ oraz

$\mathbf{l}_{I_1^{k-1}} := (l_{I_1^{k-1},I^{k-1}})_{I^{k-1}\subseteq I^k,\, I^{k-1}\neq I_1^{k-1}} \quad \}$

Oblicz $\det \mathbf{L}^T_{I_1^{k-1},I_1^{k-1}}$;

$a_{I_1^{k-1}} := 1$;

$\sigma(I^k) := \sum_{I^{k-1}\subseteq I^k} V(I^{k-1})$;

for $I^{k-1} \subseteq I^k$ **do begin**

$d(I^{k-1}) := \sigma(I^k) - V(I^{k-1})$;

$\delta(I^{k-1}) := a_{I^{k-1}} \det \mathbf{L}^T_{I_1^{k-1},I_1^{k-1}} \varepsilon_0^{-d(I^{k-1})}$;

end;

for $J^k \in S^k \cup \{u+2\}$, $J^k \neq I^k$ **do**

$d(I^k, J^k) := \min_{\substack{I^{k-1}\subseteq I^k \\ J^{k-1}\subseteq J^k}} [d(I^{k-1}) + d(I^{k-1}, J^{k-1})]$;

$V(I^k) := \min_{\substack{J^k\in S^k \\ J^k\neq I^k}} d(I^k, J^k)$;

for $J^k \in \arg\min_{\substack{J_0^k\in S^k \\ J_0^k\neq I^k}} d(I^k, J_0^k) \cup \{\{u+2\}\}$ **do begin**

if $J^k \neq \{u+2\}$ **then** $E^k := E^k \cup \{(I^k, J^k)\}$**;**

$$\delta(I^k, J^k) := \sum_{\substack{(I^{k-1},J^{k-1}) \in \arg\min_{\substack{I_0^{k-1} \subseteq I^k \\ J_0^{k-1} \subseteq J^k}} [d(I_0^{k-1}) + d(I_0^{k-1}, J_0^{k-1})]}} \delta(I^{k-1})\delta(I^{k-1}, J^{k-1})$$

end

end

end;

3) **{** W tej części obliczam współczynniki a_i, $i \in S \setminus R$. **}**

$W := S^k \setminus \{\{u+1\}\}$**;**

for $I^k \in W$ **do** $a(I^k) := d(I^k, \{u+2\}) - V(I^k)$**;**

repeat

$M := \arg\min_{I_0^k \in W} a(I_0^k)$**;** $W := W \setminus M$**;**

for $I^k \in M$**,** $i \in I^k$ **do** $a_i := a(I^k)$**;**

for $I^k \in W$ **do**

$a(I^k) := a(I^k) \wedge \min_{J^k \in M} \left[d(I^k, J^k) - V(I^k) + a(I^k)\right]$

until $W = \emptyset$**;**

4) **{** W tej części obliczam współczynniki α_i, $i \in S \setminus R$ **}**

for $I^k, J^k \in S^k$**,** $I^k \neq J^k$ **do**

if $(I^k, J^k) \in E^k$ **then** $l_{I^k,J^k} := -\delta(I^k, J^k)\varepsilon_0^{d(I^k,J^k)}$

else $l_{I^k,J^k} := 0$**;**

for $I^k \in S^k \setminus \{\{u+1\}\}$ **do** $b_{I^k} := -\delta(I^k, \{u+2\})\varepsilon_0^{d(I^k,\{u+2\})}$

Rozwiąż (np. za pomocą algorytmu 3.2) równanie

$\mathbf{L}_{\{u+1\},\{u+1\}}\mathbf{x} = \mathbf{b}$**;**

for $I^k \in S^k \setminus \{\{u+1\}\}$ **do**

for $i \in I^k$ **do**

$\alpha_i := x_{I^k}\varepsilon_0^{-a(I^k)}$

end.

Algorytm 4.6.

input: Macierze $\boldsymbol{\Delta}(R|R)$, $\mathbf{D}(R|R)$ bez elementów diagonalnych, wektory $\boldsymbol{\delta}_R$, $\mathbf{d}_R$, $\boldsymbol{\zeta}$, $\mathbf{z}$, liczba $\varepsilon_0 \in (0, \varepsilon_1)$

output: Wektory $\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{a}$.

begin

1) **for** $k = 1$ **to** u **do begin**

$d_{k,u+1} := d_{kR}$**;** $\delta_{k,u+1} := \delta_{kR}$**;**

$d_{k,u+2} := z_k$**;** $\delta_{k,u+2} := \zeta_k$**;**

end;

2) $k := 0$**;** $S^0 := \{\{i\} : i = 1, \ldots, u+1\}$**;** $E^0 := \emptyset$**;**

{ Podobnie jak w algorytmie 4.5, część 2) jest hierarchiczną agregacją grafu wyznaczonego przez macierz $(d_{ij})_{i,j=1}^{u+1}$, $i \neq j$, bez krawędzi wychodzących z $u+1$. **}**

for $\{i\} \in S^0 \setminus \{\{u+1\}\}$ **do begin**

for $\{j\} \in S^0 \cup \{\{u+2\}\}$**,** $j \neq i$ **do begin**

$\bar{\delta}(\{i\},\{j\}) := \delta_{i,j}$**;** $\bar{d}(\{i\},\{j\}) := d_{ij}$**;**

end;

$\bar{V}(\{i\}) := \min_{\substack{\{l\}\in S^0 \\ l\neq i}} d_{il}$**;**

for $j \in \arg\min_{\substack{\{l\}\in S^0 \\ l\neq i}} d_{il}$ **do** $E^k := E^k \cup \{(\{i\},\{j\})\}$

end;

Znajdź (np. za pomocą algorytmu 2.1) podział zbioru S^0 na klasy zamknięte i zbiór stanów nieistotnych w grafie (S^0, E^0)**;**

while W grafie (S^k, E^k) istnieją klasy zamknięte o mocy większej niż 1 **do begin**

$k := k+1$**;** $E^k := \emptyset$**;**

$S^k := \{I^k :$ I^k jest sumą wszystkich stanów należących do tej samej klasy zamkniętej albo stanem nieistotnym w grafie $(S^{k-1}, E^{k-1})\}$**;**

for $I^k \in S^k \setminus \{u+1\}$ **do begin**

for $I^{k-1}, J^{k-1} \subseteq I^k$**,** $I^{k-1} \neq J^{k-1}$ **do**

if $(I^{k-1}, J^{k-1}) \in E^{k-1}$ **then**

$\bar{l}_{I^{k-1},J^{k-1}} := -\bar{\delta}(I^{k-1}, J^{k-1})\varepsilon_0^{\bar{d}(I^{k-1},J^{k-1})}$

else $\bar{l}_{I^{k-1},J^{k-1}} := 0$**;**

Rozwiąż (np. za pomocą algorytmu 3.1) równanie

$\bar{\mathbf{L}}^T_{I_1^{k-1},I_1^{k-1}} \bar{\mathbf{a}}_{I_1^{k-1}} = -\bar{\mathbf{l}}_{I_1^{k-1}}$ dla pewnego $I_1^{k-1} \subseteq I^k$**;**

{ $\bar{\mathbf{a}}_{I_1^{k-1}} := (\bar{a}_{I^{k-1}})_{I^{k-1}\subseteq I^k,\, I^{k-1}\neq I_1^{k-1}}$ oraz

$\bar{\mathbf{l}}_{I_1^{k-1}} := (\bar{l}_{I_1^{k-1},I^{k-1}})_{I^{k-1}\subseteq I^k,\, I^{k-1}\neq I_1^{k-1}}$ **}**

$\bar{a}_{I_1^{k-1}} := 1$**;**

$v(I^k) := \max_{I^{k-1} \subseteq I^k} \bar{V}(I^{k-1})$;

$\bar{\nu}(I^k) := \sum_{I^{k-1} \in \arg\max_{I_0^{k-1} \subseteq I^k} \bar{V}(I_0^{k-1})} \bar{a}_{I^{k-1}}$;

for $I^{k-1} \subseteq I^k$ **do begin**
$h(I^{k-1}) := v(I^k) - \bar{V}(I^{k-1})$;
$\eta(I^{k-1}) := \bar{a}_{I^{k-1}} \varepsilon_0^{-h(I^{k-1})} / \bar{\nu}(I^k)$;
end;
for $J^k \in S^k \cup \{u+2\}$, $J^k \neq I^k$ **do**

$\bar{d}(I^k, J^k) := \min_{\substack{I^{k-1} \subseteq I^k \\ J^{k-1} \subseteq J^k}} [h(I^{k-1}) + \bar{d}(I^{k-1}, J^{k-1})]$;

$\bar{V}(I^k) := \min_{\substack{J^k \in S^k \\ J^k \neq I^k}} \bar{d}(I^k, J^k)$;
for $J^k \in \arg\min_{\substack{J_0^k \in S^k \\ J_0^k \neq I^k}} \bar{d}(I^k, J_0^k) \cup \{\{u+2\}\}$ **do begin**
if $J^k \neq \{u+2\}$ **then** $E^k := E^k \cup \{(I^k, J^k)\}$;

$\bar{\delta}(I^k, J^k) := \sum_{\substack{(I^{k-1}, J^{k-1}) \in \arg\min \\ I_0^{k-1} \subseteq I^k \\ J_0^{k-1} \subseteq J^k}} \eta(I^{k-1}) \bar{\delta}(I^{k-1}, J^{k-1})$ $[h(I_0^{k-1}) + \bar{d}(I_0^{k-1}, J_0^{k-1})]$

end
end
end;

3) **{** W tej części obliczam współczynniki a_i, $i \in S \setminus R$. **}**
$W := S^k \setminus \{\{u+1\}\}$;
for $I^k \in W$ **do** $a(I^k) := \bar{d}(I^k, \{u+2\}) - \bar{V}(I^k)$;
repeat
$M := \arg\min_{I_0^k \in W} a(I_0^k)$; $W := W \setminus M$;
for $I^k \in M$, $i \in I^k$ **do** $a_i := a(I^k)$;
for $I^k \in W$ **do**
$a(I^k) := a(I^k) \wedge \min_{J^k \in M} \left[\bar{d}(I^k, J^k) - \bar{V}(I^k) + a(I^k)\right]$
until $W = \emptyset$;

4) **{** W tej części obliczam współczynniki α_i, $i \in S \setminus R$ **}**
for $I^k, J^k \in S^k$, $I^k \neq K^k$ **do**

if $(I^k, J^k) \in E^k$ **then** $\bar{l}_{I^k,J^k} := -\bar{\delta}(I^k, J^k)\varepsilon_0^{\bar{d}(I^k,J^k)}$
else $\bar{l}_{I^k,J^k} := 0$**;**
for $I^k \in S^k \setminus \{\{u+1\}\}$ **do** $\bar{b}_{I^k} := -\bar{\delta}(I^k, \{u+2\})\varepsilon_0^{\bar{d}(I^k,\{u+2\})}$
Rozwiąż (np. za pomocą algorytmu 3.2) równanie
$\bar{\mathbf{L}}_{\{u+1\},\{u+1\}}\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{b}}$**;**
for $I^k \in S^k \setminus \{\{u+1\}\}$ **do**
for $i \in I^k$ **do**
$\alpha_i := \bar{x}_{I^k}\varepsilon_0^{-a(I^k)}$
end.

W następnym algorytmie obliczymy współczynniki asymptotyczne dla macierzy granicznej *PZŁM*. Wykorzystamy w nim jako procedury algorytmy wprowadzone poprzednio.

Algorytm 4.7.

input: Macierze $\mathbf{\Delta} = (\delta_{ij})_{i,j\in S}$, $\mathbf{D} = (d_{ij})_{i,j\in S}$ bez elementów diagonalnych, odpowiadające *PZŁM*, $\varepsilon_0 \in (0, \varepsilon_1)$.
output: Macierze $(\eta_j^k)_{j\in C_k,\, k=1,\dots,m}$, $(h_j^k)_{j\in C_k,\, k=1,\dots,m}$, $(c_i^k)_{i\in T,\, k=1,\dots,m}$ oraz $(\gamma_i^k)_{i\in T,\, k=1,\dots,m}$.
begin
1) Znajdź (np. za pomocą algorytmu 2.1) podział zbioru S na klasy zamknięte $C_1, \dots, C_m$ oraz zbiór stanów nieistotnych T w grafie $(S, \{(i,j) : \delta_{ij} > 0\})$**;**
2) for $k := 1$ **to** m **do**

Znajdź wektory $(\eta_j^k)_{j\in C_k}$, $(h_j^k)_{j\in C_k}$ (np. za pomocą algorytmu 4.1, algorytmu 4.3 lub algorytmu 4.4 zastosowanego do macierzy $(\delta_{ij})_{i,j\in C_k}$ oraz $(d_{ij})_{i,j\in C_k}$ bez elementów diagonalnych)**;**

3) for $k = 1, \dots, m$**,** $i \in T$ **do begin**
$d_{ik} := \min_{j\in C_k} d_{ij}$**;**
$\delta_{ik} := \sum_{j\in \arg\min_{j_0\in C_k} d_{ij_0}} \delta_{ij}$
end;

Znajdź macierze $(c_i^k)_{i\in T,\, k=1,\dots,m}$ oraz $(\gamma_i^k)_{i\in T,\, k=1,\dots,m}$ (np. za pomocą algorytmu 4.2, algorytmu 4.5 lub algorytmu 4.6 zastosowanego do

zbiorów $R = \{1, \ldots, m\}$, $S' = T \dot{\cup} R$ oraz macierzy $(\delta_{ij})_{i\in T,\, j\in S'}$, $(d_{ij})_{i\in T,\, j\in S'}$ bez elementów δ_{ii}, d_{ii} dla $i \in T$).

end.

Uwagi 4.2.

(1) W znanych przykładach *PZŁM* występujących w zastosowaniach, elementy macierzy $\mathbf{D}$ są całkowite, zatem algorytmy 4.1–4.7 dokładnie obliczają wektor $\mathbf{a}$. Natomiast błąd w obliczeniu wektora $\boldsymbol{\alpha}$, związany z reprezentacją zmiennoprzecinkową oraz wykonywaniem działań w arytmetyce zmiennoprzecinkowej, można oszacować za pomocą twierdzeń rozdziału 3.

(2) Łatwo zauważyć, że koszt algorytmów 4.1–4.2 jest asymptotycznie równoważny $(2/3)s^3$. Koszt algorytmów 4.3–4.6 jest rzędu $O(s^3)$. Wydaje się, że dla dużych *ŁM*, w których jest wiele klas zamkniętych, algorytmy 4.3–4.6 są bardziej efektywne od algorytmów 4.1–4.2.

(3) Zauważmy, że z dowodu poprawności algorytmu 4.1, podobnie jak z twierdzenia 4.1, wynika, że wektory $\mathbf{a}$ i $\boldsymbol{\alpha}$ są funkcjami parametrów $\boldsymbol{\Delta}, \mathbf{D}, \boldsymbol{\zeta}, \mathbf{z}$.

(4) Współczynniki $\delta(i)$ oraz $\eta(i)$, wyznaczane w algorytmach 4.3–4.6, można obliczyć za pomocą algorytmów 4.1–4.2.

4.3. **Analiza algorytmów.**

Algorytmy 4.1 i 4.2 są uogólnieniem algorytmów 3.1 i 3.2 na problemy (4.2) i (4.3). Ich poprawność jest konsekwencją poprawności algorytmów 3.1 i 3.2 oraz własności relacji "$\sim$" opisanych w lematach 4.1–4.3.

Dowód poprawności algorytmu 4.1.

Niech $\mathbf{L}_R^{(k)}(\varepsilon) := \left(l_{ij}^{(k)}(\varepsilon)\right)_{i,j=k+1}^{u+1}$, $\mathbf{b}^{(k)}(\varepsilon)$, $\mathbf{l}_R^T(\varepsilon)$, $u_k(\varepsilon)$ dla $k = 1, \ldots, u$ mają znaczenie podobne jak w rozdziale 3.2. Niech ponadto $\mathbf{D}_R^{(1)} := \left(d_{ij}^{(1)}\right)_{i,j=1}^{u+1}$, $\boldsymbol{\Delta}_R^{(1)} := \left(\delta_{ij}^{(1)}\right)_{i,j=1}^{u+1}$ będą macierzami takimi, że

$$\mathbf{D}_R^{(1)} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}^T(R|R) & \mathbf{z} \\ \mathbf{d}_R^T & z \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{\Delta}_R^{(1)} := \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Delta}^T(R|R) & \boldsymbol{\zeta} \\ \boldsymbol{\delta}_R^T & \zeta \end{bmatrix},$$

gdzie

$$\mathbf{d}_R^T := (d_{1R}, \dots, d_{uR}), \quad d_{iR} := \min_{j\in R} d_{ij},$$
$$\boldsymbol{\delta}_R^T := (\delta_{1R}, \dots, \delta_{uR}), \quad \delta_{iR} := \sum_{j\in R} \delta_{ij}\mathbf{1}(d_{ij} = d_{iR})$$

dla $i = 1, \dots, u$ oraz

$$z := \min_{j\le u} z_j, \quad \zeta := -\sum_{j=1}^{u} \zeta_j \mathbf{1}(z_j = z).$$

Oczywiście

$$-l_{ij}^{(1)}(\varepsilon) \sim \delta_{ij}^{(1)} \varepsilon^{d_{ij}^{(1)}} \quad \text{dla } i, j = 1, \dots, u+1,\ i \neq j.$$

Dla dowodu poprawności "eliminacji" zauważmy, że z lematu 4.3 wynikają relacje $l_{iR} \sim \delta_{iR}\varepsilon^{d_{iR}}$ dla $i = 1, \dots, u$ oraz $u_1(\varepsilon) \sim \delta_1 \varepsilon^{d_1}$, gdzie

$$d_1 := \min_{j>1} d_{1j}^{(1)}, \quad \delta_1 := \sum_{j>1} \delta_{1j}^{(1)} \mathbf{1}(d_{1j}^{(1)} = d_1).$$

W kolejnym k-tym kroku metody ($k = 1, \dots, u$) definiujemy indukcyjnie macierze

$$\boldsymbol{\Delta}_R^{(k+1)} = \left(\delta_{ij}^{(k+1)}\right)_{i,j=k+1}^{u+1}, \quad \mathbf{D}_R^{(k+1)} := \left(\delta_{ij}^{(k+1)}\right)_{i,j=k+1}^{u+1}$$

bez elementów diagonalnych oraz liczby d_{k+1}, δ_{k+1} w następujący sposób.

Dla $i, j = k+1, \dots, u+1$, $i \neq j$

$$\begin{aligned}
d_{ij}^{(k+1)} :=& d_{ij}^{(k)} \wedge (d_{ik}^{(k)} + d_{kj}^{(k)} - d_k) \\
\delta_{ij}^{(k+1)} :=& \delta_{ij}^{(k)} \mathbf{1}(d_{ij}^{(k)} = d_{ij}^{(k+1)}) \\
&+ (\delta_{ik}^{(k)} \delta_{kj}^{(k)} / \delta_k) \mathbf{1}(d_{ik}^{(k)} + d_{kj}^{(k)} - d_k = d_{ij}^{(k+1)}); \\
d_{k+1} :=& \min_{j>k+1} d_{k+1,j}^{(k+1)}; \\
\delta_{k+1} :=& \sum_{j>k+1} \delta_{k+1,j}^{(k+1)} \mathbf{1}(d_{k+1,j}^{(k+1)} = d_{k+1}).
\end{aligned}$$

Z lematów 4.1–4.3 oraz założenia indukcyjnego wynika, że

$$\begin{aligned}
l_{ij}^{(k+1)}(\varepsilon) &= l_{ij}^{(k)}(\varepsilon) - \frac{l_{ik}^{(k)}(\varepsilon) l_{kj}^{(k)}(\varepsilon)}{u_k(\varepsilon)} \\
&\sim \delta_{ij}^{(k)} \varepsilon^{d_{ij}^{(k)}} + \frac{\delta_{ij}^{(k)} \delta_{kj}^{(k)}}{\delta_k} \varepsilon^{d_{ij}^{(k)} + d_{kj}^{(k)} - d_k}
\end{aligned}$$

$$\sim \delta_{ij}^{(k+1)} \varepsilon^{d_{ij}^{(k+1)}}.$$

Ponadto ze wzoru (3.20) wynika, że

$$u_{k+1}(\varepsilon) \sim \delta_{k+1} \varepsilon^{d_{k+1}}.$$

Dla dowodu poprawności "podstawienia wstecz" korzystamy z lematów 4.1–4.3 i otrzymujemy, przez indukcję dla $k = 1, \ldots, u$

$$x_k(\varepsilon) \sim \left(\delta_{1,u+1}^{(k)} \varepsilon^{d_{1,u+1}^{(k)}} + \sum_{j=k+1}^{u} \delta_{jk}^{(k)} \varepsilon^{d_{jk}^{(k)}} x_j(\varepsilon) \right) \delta_k^{-1} \varepsilon^{-d_k}.$$

□

Podobnie dowodzimy poprawności algorytmu 4.2.

W dalszej części rozdziału udowodnimy poprawność algorytmów 4.3 i 4.4.

Analogicznie do definicji parametrów lasów skierowanych w grafie $g^*(\mathbf{D})$, podanych przed stwierdzeniem 4.4, można wprowadzić następujące parametry lasów skierowanych o dziedzinie D: $d(f\big|D)$, $\delta(f\big|D)$, $d(F\big|D)$, $\delta(F\big|D)$, $d(R\big|D)$, $\delta(R\big|D)$, $d_{ij}(R\big|D)$, $\delta_{ij}(R\big|D)$, $d(i\big|D)$, $\delta(i\big|D)$.

Przyjmijmy ponadto:

$$\begin{aligned} n(D) &:= \min_{j \in D} d(j\big|D), \\ \nu(D) &:= \sum_{\substack{j \in D \\ d(j|D)=n(D)}} \delta(j\big|D), \\ h(i\big|D) &:= d(j\big|D) - n(D), \\ \eta(i\big|D) &:= \delta(j\big|D)/\nu(D). \end{aligned}$$

Dla $I, J \subseteq S$ określmy

$$\begin{aligned} d(I,J) &:= \min_{\substack{i \in I \\ j \in J}} [d(i\big|I) + d_{ij}], \\ \delta(I,J) &:= \sum_{\substack{i \in I,\, j \in J \\ d(i|I)+d_{ij}=d(I,J)}} \delta(i|I)\delta_{ij}, \\ \bar{d}(I,J) &:= \min_{\substack{i \in I \\ j \in J}} [h(i\big|I) + d_{ij}], \\ \bar{V}(I) &:= \bar{d}(I, S \setminus I), \end{aligned}$$

$$\bar{\delta}(I,J) := \sum_{\substack{i\in I,\, j\in J \\ h(i|I)+d_{ij}=\bar{d}(I,J)}} \eta(i|I)\delta_{ij}.$$

Niech $g_{\min}(\mathbf{D}) := \big(S, \{(i,j) \in E_{g^*(\mathbf{D})} :\ d_{ij} = \min_{a\neq i} d_{ia}\}\big)$.

Lemat 4.4. *(Własności najkrótszych lasów)*

Niech $R \subseteq S$ oraz $f \in F(R)$ w grafie $g^*(\mathbf{D})$. Załóżmy, że $d(f) = d(R)$. Wtedy f ma następujące własności.

(1) *Dla dowolnej klasy zamkniętej I w grafie $g_{\min}(\mathbf{D})$ takiej, że $I \cap R = \emptyset$ spełnione są warunki:*

$$\exists!\ (i,j) \in E_f \text{ taka, że } i \in I,\ j \in S \setminus I; \tag{4.4}$$

$$\text{jeżeli } (i,j) \in E_f \text{ oraz } i,j \in I,\ \text{to } (i,j) \in E_{g_{\min}(\mathbf{D})}. \tag{4.5}$$

(2) *Dla dowolnej klasy zamkniętej I w grafie $g_{\min}(\mathbf{D})$ takiej, że $R \subseteq I$ spełnione są warunki:*

$$E_f = E_{f_1} \dot{\cup}\, E_{f_2}, \quad \text{gdzie } f_1 \in F(R\big|I) \text{ oraz } f_2 \in F(I); \tag{4.6}$$

$$\text{jeżeli } (i,j) \in E_{f_1} \text{ oraz } i,j \in I,\ \text{to } (i,j) \in E_{g_{\min}(\mathbf{D})}. \tag{4.7}$$

(3) *Dla dowolnych $I, J \subseteq S \setminus R$, które są różnymi klasami zamkniętymi lub singletonami zawierającymi stan nieistotny w grafie $g_{\min}(\mathbf{D})$, spełniony jest warunek:*

$$\text{jeżeli } (i,j) \in E_f \text{ oraz } i \in I,\ j \in J,\ \text{to} \quad d(i\big|I) + d_{ij} = \min_{i_0\in I,\, j_0\in J}[d(i_0\big|I) + d_{i_0j_0}]. \tag{4.8}$$

Dowód. Dla dowodu nie wprost części (1) załóżmy, że f nie spełnia warunku (4.4) lub (4.5) dla pewnej klasy zamkniętej w grafie $g^*(\mathbf{D})$ rozłącznej z R. Łatwo zauważyć, że istnieje stan $i_0 \in I$ taki, że jego droga do R, zawarta w lesie f, prowadzi przez stany nie należące do I. Określmy indukcyjnie: $I_0 := \{i_0\}$, $f_0 := f$ oraz dla $k = 0, 1, \ldots$

$I_{k+1} := \Big\{i \in I \setminus (I_0 \dot{\cup} \ldots \dot{\cup}\, I_k) :\ \exists_{j\in I_k}\ (i,j) \in E_{g_{\min}(\mathbf{D})}\Big\}$, $\quad f_{k+1} := (S, E_{k+1})$, gdzie

$$E_{k+1} := \{(i,j) \in E_{f_k} : \ i \notin I_{k+1}\} \dot\cup \{(i, n(i)) : \ i \in I_{k+1}\},$$

$n(i)$ — wybrany stan należący do I_k taki, że $(i, n(i)) \in E_{g_{\min}(\mathbf{D})}$.

Łatwo zauważyć, że f_k jest lasem o korzeniu R oraz

$$d(R) \leq d(f_{k+1}) \leq d(f_k).$$

Ponadto ze skończoności I wynika, że istnieje K taki, że dla dowolnego $k \geq K$

$$f_k = f_{K-1}, \quad I_k = I_K = \emptyset$$

oraz f_{K-1} jest lasem spełniającym warunki (4.4) i (4.5) dla I. Z założenia dowodu wynika, że istnieją różne pary (i_1, j_1), (i_2, j_2) zawarte w f takie, że $i_1, i_2 \in I$ oraz $j_1, j_2 \in S \setminus I$. Stąd wynika, że

$$d(R) \leq d(f_{k-1}) < d(f).$$

Sprzeczność.

W podobny sposób dowodzimy część (2).

Dla dowodu nie wprost części (3) załóżmy, że istnieje taka para $(a, b) \in E_f$, że $a \in I$, $b \in J$, $I, J \subseteq S \setminus R$ są różnymi klasami zamkniętymi lub singletonami zawierającymi stany nieistotne w grafie $g_{\min}(\mathbf{D})$ oraz

$$d(a\big|I) + d_{ab} > \min_{\substack{i_0 \in I \\ j_0 \in J}} [d(i_0\big|I) + d_{i_0 j_0}].$$

Z części (1) wynika, że

$$d(f\big|I) = d(a\big|I).$$

Przyjmijmy

$$\begin{aligned} f_1 &:= (S, E_1), \quad \text{gdzie} \\ E_1 &:= E_f \setminus (a,b) \dot\cup (i,j) \quad \text{oraz} \quad (i,j) \in \operatorname*{arg\,min}_{i_0 \in I,\, j_o \in J} [d(i_0\big|I) + d_{i_0 j_0}]. \end{aligned}$$

Łatwo zauważyć, że f_1 jest lasem o korzeniu R spełniającym warunki (1)–(2) oraz warunek (4.8) dla I, J. Stąd wynika, że

$$d(R) \leq d(f_1) < d(f).$$

Sprzeczność. □

Dla analizy algorytmów 4.3–4.6 wygodnie będzie wprowadzić indukcyjnie następujące wielkości

$$S^0 := \{\{i\} : \ i \in S\};$$
$$d^0(\{i\},\{j\}) = \bar{d}^0(\{i\},\{j\}) := d_{ij};$$
$$\bar{V}^0(\{i\}) := \min_{j\neq i} d_{ij};$$
$$E^0 := \{(I^0, J^0) : \ I^0, J^0 \in S^0, \ I^0 \neq J^0, \ d^0(I^0, J^0) = \bar{V}^0(I^0) < \infty\};$$
$$g^0 := (S^0, E^0);$$

Dla $k = 1, 2, \ldots$

$S^k := \{I^k : \ I^k$ jest sumą wszystkich stanów należących do tej samej klasy zamkniętej albo stanem nieistotnym w $g^{k-1}\}$;

dla dowolnych $I^k, J^k \in S^k, \ I^k \neq J^k$

$$v(I^k) := \max_{I^{k-1}\subseteq I^k} \bar{V}^{k-1}(I^{k-1}),$$
$$n(I^k) := \sum_{I^{k-1}\subseteq I^k} \bar{V}^{k-1}(I^{k-1}) - v(I^k),$$
$$\bar{d}^k(I^k, J^k) := v(I^k) + \min_{\substack{I^{k-1}\subseteq I^k \\ J^{k-1}\subseteq J^k}} [\bar{d}^{k-1}(I^{k-1}, J^{k-1}) - \bar{V}^{k-1}(I^{k-1})],$$
$$d^k(I^k, J^k) := \bar{d}^k(I^k, J^k) + n(I^k),$$
$$\bar{V}^k(I^k) := \min_{J^k\neq I^k} \bar{d}^k(I^k, J^k),$$

$$E^k := \left\{(I^k, J^k) : \ I^k, J^k \in S^k, \ I^k \neq J^k, \ \bar{d}(I^k, J^k) = \bar{V}(I^k) < \infty\right\};$$
$$g^k := (S^k, E^k).$$

Bezpośrednio z lematu 4.4 i przyjętych definicji wynikają następujące lematy.

Lemat 4.5. *Niech $i \in I^1 \in S$. Wtedy*

$$d(i) = d(i\big|I^1) + d^1(I^1); \tag{1}$$
$$\delta(i) = \delta(i\big|I^1)\delta^1(I^1). \tag{2}$$

Lemat 4.6. *Niech $I^1, J^1 \in S^1$, $I^1 \neq J^1$, $R \cap (I^1 \cup J^1) = \emptyset$, $i \in I^1$. Wtedy*

$$\min_{j \in J^1} d_{ij}(R, j) = d(j\big|J^1) + d^1_{I^1,J^1}(R, J^1); \tag{1}$$

$$\sum_{\substack{j \in \arg\min d_{ij_0}(R, j_0) \\ j_0 \in J^1}} \delta_{ij} = \delta(j\big|J^1)\delta^1_{I^1,J^1}(R, J^1). \tag{2}$$

Następny lemat wyraża związek między współczynnikami $\delta^1(\cdot,\cdot)$, $d^1(\cdot,\cdot)$ oraz $\bar{\delta}^1(\cdot,\cdot)$, $\bar{d}^1(\cdot,\cdot)$.

Lemat 4.7. *Niech $I^1 \in S^1$. Wtedy*

$$d^1(I^1) + n(I^1) = \bar{d}^1(I^1) + \sum_{J^1 \in S^1} n(J^1); \tag{1}$$

$$\delta^1(I^1)\nu(I^1) = \bar{\delta}^1(I^1) \prod_{J^1 \in S^1} \nu(J^1). \tag{2}$$

Dowód . Zauważmy, że dla $i \in I^1 \in S^1$ zachodzą równości:

$$d(i\big|I^1) = n(I^1) + h(i\big|I^1) \quad \text{oraz}$$
$$\delta(i\big|I^1) = \nu(I^1)\eta(i\big|I^1).$$

Część (1) jest konsekwencją następujących równości.

$$\begin{aligned}
d^1(I^1) &= \min_{f^1 \in F^1(I^1)} d^1(f^1) \\
&= \min_{f^1 \in F^1(I^1)} \sum_{(I^1_0, J^1_0) \in f^1} d^1(I^1_0, J^1_0) \\
&= \min_{f^1 \in F^1(I^1)} \sum_{(I^1_0, J^1_0) \in f^1} \min_{\substack{i \in I^1_0 \\ j \in J^1_0}} [d(i\big|I^1_0) + d_{ij}] \\
&= \min_{f^1 \in F^1(I^1)} \sum_{(I^1_0, J^1_0) \in f^1} \left(n(I^1_0) + \min_{\substack{i \in I^1_0 \\ j \in J^1_0}} [h(i\big|I^1_0) + d_{ij}] \right) \\
&= \min_{f^1 \in F^1(I^1)} \sum_{(I^1_0, J^1_0) \in f^1} \left(n(I^1_0) + \bar{d}^1(I^1_0, J^1_0) \right)
\end{aligned}$$

$$= \sum_{\substack{I_0^1 \in S^1 \\ I_0^1 \neq I^1}} n(I_0^1) + \min_{f^1 \in F^1(I^1)} \bar{d}^1(f^1)$$
$$= \sum_{\substack{I_0^1 \in S^1 \\ I_0^1 \neq I^1}} n(I_0^1) + \bar{d}^1(I^1)$$

Część (2) jest konsekwencją następujących równości.

$$\begin{aligned}
\delta^1(I^1) &= \sum_{\substack{f^1 \in F^1(I^1) \\ d^1(f^1) = d^1(I^1)}} \delta^1(f^1) \\
&= \sum_{\substack{f^1 \in F^1(I^1) \\ d^1(f^1) = d^1(I^1)}} \prod_{(I_0^1, J_0^1) \in f^1} \delta^1(I_0^1, J_0^1) \\
&= \sum_{\substack{f^1 \in F^1(I^1) \\ d^1(f^1) = d^1(I^1)}} \prod_{(I_0^1, J_0^1) \in f^1} \left(\sum_{\substack{i \in I_0^1,\, j \in J_0^1 \\ d(i|I_0^1) + d_{ij} = d^1(I_0^1, J_0^1)}} \delta(i \big| I_0^1) \delta_{ij} \right) \\
&= \sum_{\substack{f^1 \in F^1(I^1) \\ \bar{d}^1(f^1) = \bar{d}^1(I^1)}} \prod_{(I_0^1, J_0^1) \in f^1} \nu(I_0^1) \left(\sum_{\substack{i \in I_0^1,\, j \in J_0^1 \\ h(i|I_0^1) + d_{ij} = \bar{d}(I_0^1, J_0^1)}} \eta(i \big| I_0^1) \delta_{ij} \right) \\
&= \sum_{\substack{f^1 \in F^1(I^1) \\ \bar{d}^1(f^1) = \bar{d}^1(I^1)}} \prod_{\substack{I_0^1 \in S^1 \\ I_0^1 \neq I^1}} \nu(I_0^1) \prod_{\substack{(I_0^1, J_0^1) \in f^1 \\ h(i|I_0^1) + d_{ij} = \bar{d}^1(I_0^1, J_0^1)}} \bar{\delta}^1(I_0^1, J_0^1) \\
&= \prod_{\substack{I_0^1 \in S^1 \\ I_0^1 \neq I^1}} \nu(I_0^1) \sum_{\substack{f^1 \in F^1(I^1) \\ \bar{d}^1(f^1) = \bar{d}^1(I^1)}} \bar{\delta}^1(f^1) \\
&= \prod_{\substack{I_0^1 \in S^1 \\ I_0^1 \neq I^1}} \nu(I_0^1) \bar{\delta}^1(I^1)
\end{aligned}$$

□

Lemat 4.8. *Niech* $\mathbf{x}(\varepsilon) = (x_i(\varepsilon))_{i \in S \setminus R}$ *będzie rozwiązaniem układu* (4.2) *oraz* $\boldsymbol{\pi}(\varepsilon) = (\pi_i(\varepsilon))_{i=1}^{u+1}$ *— rozkładem stacjonarnym jednoklasowego laplasjanu Markowa* $\mathbf{L}_R(\varepsilon)$*, zdefiniowanego wzorem (4.1). Wtedy otrzymujemy dla* $i \in I^1 \in S^1$*,*

$u+1 \in J^1$*:*

$$x_i(\varepsilon) \sim \frac{\delta(i\big|I^1)\varepsilon^{d(i|I^1)}\delta^1(I^1)\varepsilon^{d^1(I^1)}}{\delta(u+1\big|J^1)\varepsilon^{d(u+1|J^1)}\delta^1(J^1)\varepsilon^{d^1(J^1)}}; \tag{1}$$

$$x_i(\varepsilon) \sim \frac{\pi_i(\varepsilon)}{\pi_{u+1}(\varepsilon)} \quad \textit{oraz} \tag{2} \quad \text{(a)}$$

$$\pi_i(\varepsilon) \sim \eta(i\big|I^1)\varepsilon^{h(i|I^1)}\eta^1(I^1)\varepsilon^{h^1(I^1)}. \tag{b}$$

Dowód . Ze stwierdzenia 4.4 i lematu 4.5 otrzymujemy relacje

$$\begin{aligned} w(i)(\varepsilon) &\sim \delta(i)\varepsilon^{d(i)} \\ &\sim \delta(i\big|I^1)\varepsilon^{d(i|I^1)}\delta^1(I^1)\varepsilon^{d^1(I^1)}. \end{aligned} \tag{4.9}$$

Stąd oraz z twierdzenia 4.1 (2) otrzymujemy część (1). Część (2) (a) wynika ze wzoru (4.9), twierdzenia 4.2 oraz z części (1).

Dla dowodu części (2) (b) zauważmy, że

$$\begin{aligned} &\delta(i\big|I^1)\varepsilon^{d(i|I^1)}\delta^1(I^1)\varepsilon^{d^1(I^1)} \\ &\sim \frac{\delta(i\big|I^1)}{\nu(I^1)}\varepsilon^{d(i|I^1)-n(I^1)}\delta^1(I^1)\nu(I^1)\varepsilon^{d^1(I^1)+n(I^1)} \\ &\eta(i\big|I^1)\varepsilon^{h(i|I^1)}\delta^1(I^1)\nu(I^1)\varepsilon^{d^1(I^1)+n(I^1)}. \end{aligned}$$

Ponadto

$$h^1(I^1) = \bar{d}^1(I^1) - \min_{J^1 \in S^1} \bar{d}^1(J^1)$$

oraz

$$\eta^1(I^1) = \bar{\delta}^1(I^1) \Big/ \left(\sum_{J^1 \in S^1 :\, h^1(J^1)=0} \bar{\delta}^1(J^1) \right).$$

W rezultacie ze wzoru (4.9), twierdzenia 4.2 oraz lematu 4.7 otrzymujemy tezę. □

Lemat 4.9. *Niech* $\mathbf{x}(\varepsilon) = (x_i(\varepsilon))_{i \in S\setminus R}$ *będzie rozwiązaniem układu* (4.3)*. Załóżmy, że dla dostatecznie małych* ε*, w grafie* $g(\mathbf{L})$ *istnieje las o korzeniu* R*. Wtedy otrzymujemy dla* $i \in I^1 \in S^1$*,* $I^1 \cap R = \emptyset$

$$x_i(\varepsilon) \sim \frac{\sum_{J^1 \in S^1} \delta^1_{I^1,J^1}(R,J^1)\varepsilon^{d^1_{I^1,J^1}(R,J^1)}\delta^1(J^1,\{u+1\})\varepsilon^{d^1(J^1,\{u+1\})}}{\delta^1(R)\varepsilon^{d^1(R)}}; \tag{1}$$

$$x_i(\varepsilon) \sim \frac{\sum_{J^1 \in S^1} \bar{\delta}^1_{I^1,J^1}(R,J^1)\varepsilon^{\bar{d}^1_{I^1,J^1}(R,J^1)}\bar{\delta}^1(J^1,\{u+1\})\varepsilon^{\bar{d}^1(J^1,\{u+1\})}}{\bar{\delta}^1(R)\varepsilon^{\bar{d}^1(R)}}. \tag{2}$$

Dowód . Ze stwierdzenia 4.4 i lematu 4.6 otrzymujemy relacje

$$w(R)(\varepsilon) \sim \delta(R)\varepsilon^{d(R)} = \delta^1(R)\varepsilon^{d^1(R)}.$$

Podobnie

$$\begin{aligned}
&\sum_{j\in S\setminus R} w_{ij}(R,j)(\varepsilon)(-l_{j,u+1}(\varepsilon)) \sim \sum_{j\in S\setminus R} \delta_{ij}(R,j)\varepsilon^{d_{ij}(R)}\delta_{j,u+1}\varepsilon^{d_{j,u+1}} \\
&\sim \sum_{J^1\in S^1}\sum_{j\in J^1} \delta^1_{I^1,J^1}(R,J^1)\varepsilon^{d^1_{I^1,J^1}(R,J^1)}\delta(j\big|J^1)\delta_{j,u+1}\varepsilon^{d(j|J^1)+d_{j,u+1}} \\
&= \sum_{J^1\in S^1} \delta^1_{I^1,J^1}(R,J^1)\varepsilon^{d^1_{I^1,J^1}(R,J^1)}\delta^1(J^1,\{u+1\})\varepsilon^{d^1(J^1,\{u+1\})}.
\end{aligned}$$

W rezultacie z twierdzenia 4.1 (3) wynika część (1). Część (2) wynika z części (1) oraz lematu 4.7. □

Dla ustalonej klasy zamkniętej $I^1 \in S^1$ oraz $\varepsilon_0 \in (0,\varepsilon_1)$ zdefiniujemy teraz macierz bez elementów diagonalnych

$$\bar{\mathbf{L}}(I^1)(\varepsilon_0) := (l_{ij})_{i,j\in I^1, i\neq j},$$

gdzie

$$-l_{ij} := \begin{cases} \delta_{ij}\varepsilon^{d_{ij}} & \text{jeśli } (i,j) \in g_{\min}(\mathbf{D}) \\ 0 & \text{jeśli } (i,j) \notin g_{\min}(\mathbf{D}). \end{cases}$$

Niech wektor $\mathbf{a}_1(\varepsilon_0)$ będzie rozwiązaniem układu

$$\bar{\mathbf{L}}^T_{i_1i_1}(I^1)(\varepsilon_0)\bar{\mathbf{a}}_1(\varepsilon_0) = -(l_{i_1i})^T_{i\in I^1, i\neq i_1}$$

dla pewnego $i_1 \in I^1$; przyjmijmy $\bar{a}_{i_1}(\varepsilon_0) := 1$.

Poniższy lemat pozwala obliczać wektory $\delta(\cdot\big|I^1)$ (odpowiednio $\eta(\cdot\big|I^1)$) za pomocą wyznacznika macierzy $\mathbf{L}_{i_1i_1}(I^1)(\varepsilon_0)$ oraz wektora $\mathbf{d}(\cdot\big|I^1)$ (odpowiednio $\bar{\mathbf{a}}(\varepsilon_0) := (\bar{a}_i(\varepsilon_0))_{i\in I^1}$ oraz $\mathbf{h}(\cdot\big|I^1)$).

Lemat 4.10. *Załóżmy, że $I^1 \in S^1$ oraz $i \in I^1$. Wtedy*

$$\delta(i\big|I^1) = \bar{a}_i(\varepsilon_0)\det \bar{L}_{i_1 i_1}(\varepsilon_0)\varepsilon_0^{-d(i|I^1)}; \tag{1}$$

$$\eta(i\big|I^1) = \frac{\bar{a}_i(\varepsilon_0)\varepsilon_0^{-h(i|I^1)}}{\sum\limits_{\substack{j\in I^1\\ h(j|I^1)=0}} \bar{a}_j(\varepsilon_0)}. \tag{2}$$

Dowód . Dla dowodu części (1) zauważmy, że z wniosku 2.2 oraz lematu 2.2 otrzymujemy:

$$\begin{aligned}\delta(i\big|I^1)\varepsilon_0^{d(i|I^1)} &= \bar{w}(i\big|I^1)(\varepsilon_0)\\ &= \frac{\bar{w}(i\big|I^1)(\varepsilon_0)}{\bar{w}(i_1\big|I^1)(\varepsilon_0)}\bar{w}(i_1\big|I^1)(\varepsilon_0)\\ &= \bar{a}_i(\varepsilon_0)\det \bar{\mathbf{L}}_{i_1 i_1}(I^1)(\varepsilon_0), \quad \text{gdzie } i_1 \in I^1.\end{aligned}$$

Część (2) wynika z części (1) oraz następujących równości:

$$\begin{aligned}\eta(i\big|I^1) &= \frac{\delta(i\big|I^1)}{\sum\limits_{\substack{j\in I^1\\ d(j|I^1)=n(I^1)}} \delta(j|I^1)} = \frac{\bar{a}_i(\varepsilon_0)\varepsilon_0^{-d(i|I^1)}}{\sum\limits_{\substack{j\in I^1\\ d(j|I^1)=n(I^1)}} \bar{a}_j(\varepsilon_0)\varepsilon_0^{-n(I^1)}}\\ &= \frac{\bar{a}_i(\varepsilon_0)\varepsilon_0^{-h(i|I^1)}}{\sum\limits_{\substack{j\in I^1\\ h(j|I^1)=0}} \bar{a}_j(\varepsilon_0)}.\end{aligned}$$

□

Dowód poprawności algorytmu 4.3.

Z lematu 4.4 wynika, że dla $i \in S$, $I^1 \in S^1$, $I^2 \in S^2$ takich, że $i \in I^1 \subseteq I^2$ spełnione są równości:

$$\begin{cases} d(i\big|I^2) = d(i\big|I^1) + d^2(I^1\big|I^2)\\ \delta(i\big|I^2) = \delta(i\big|I^1)\delta^2(I^1\big|I^2). \end{cases} \tag{4.10}$$

Zatem z lematu 4.5 otrzymujemy z (4.10)

$$\begin{cases} d(i) = d(i\big|I^2) + d^2(I^2)\\ \delta(i) = \delta(i\big|I^2)\delta^2(I^2). \end{cases} \tag{4.11}$$

Stąd oraz z lematu 4.9 wynika, że

$$x_i(\varepsilon) \sim \frac{\delta(i\big|I^2)\varepsilon^{d(i|I^2)}\delta^2(I^2)\varepsilon^{d^2(I^2)}}{\delta(u+1\big|J^2)\varepsilon^{d(u+1|J^2)}\delta^2(J^2)\varepsilon^{d^2(J^2)}}, \tag{4.12}$$

gdzie $u+1 \in J^2 \in S^2$.

Zauważmy, że współczynniki $d^2(I^1\big|I^2)$ oraz $\delta^2(I^1\big|I^2)$ występujące we wzorach (4.10) możemy obliczyć podobnie jak współczynniki $d(i\big|I^1)$ oraz $\delta(i\big|I^1)$. Ponadto przez indukcję po k otrzymujemy z (4.11) równości

$$\begin{cases} d(i\big|I^{k+1}) = d(i\big|I^k) + d^{k+1}(I^k\big|I^{k+1}) \\ \delta(i\big|I^{k+1}) = \delta(i\big|I^k)\delta^{k+1}(I^k\big|I^{k+1}), \end{cases} \tag{4.13}$$

gdzie $i \in I^1 \subseteq I^2 \subseteq \ldots \subseteq I^k \subseteq I^{k+1}$ oraz $I^m \in S^m$ dla $m \leq k+1$.

Niech $K+1$ będzie najmniejszym k takim, że w grafie g^k istnieje tylko jedna klasa zamknięta I. Z założenia wynika, że $u+1 \in I$, współczynniki $d^K(J^K\big|I)$ i $\delta^K(J^K\big|I)$, gdzie $u+1 \in J^K \subseteq I$, są skończone oraz możemy je wyznaczyć podobnie do współczynników $d^1(u+1\big|J^1)$ i $\delta^1(u+1\big|J^1)$. W rezultacie ze wzorów (4.12) i (4.13) otrzymujemy

$$x_i(\varepsilon) \sim \frac{\delta(i\big|I^K)\varepsilon^{d(i|I^K)}\delta^K(I^K\big|I)\varepsilon^{d(I^K|I)}}{\delta(u+1\big|J^K)\varepsilon^{d(u+1|J^K)}\delta^K(J^K\big|I)\varepsilon^{d(J^K|I)}}.$$

□

Dowód poprawności algorytmu 4.4.

Rozumując podobnie jak w poprzednim dowodzie otrzymujemy z lematu 4.7 dla $k \leq K+1$ oraz $i \in S$, $I^k \in S^k$, $I^{k+1} \in S^{k+1}$ takich, że $i \in I^k \subseteq I^{k+1}$ równości

$$\begin{cases} h(i\big|I^{k+1}) = h(i\big|I^k) + h^{k+1}(I^k\big|I^{k+1}) \\ \eta(i\big|I^{k+1}) = \eta(i\big|I^k)\eta^{k+1}(I^k\big|I^{k+1}). \end{cases} \tag{4.14}$$

Dalsza część dowodu pozostaje bez zmian. □

Poprawności algorytmów 4.5 i 4.6 dowodzimy podobnie jak w przypadku algorytmów 4.3 i 4.4, wykorzystując zamiast lematu 4.8 — lemat 4.9. Część (4) tych algorytmów wymaga dodatkowo indukcji po iteracjach występującej tam pętli "repeat".

Poprawność algorytmu 4.7 wynika z poprawności algorytmów 4.1–4.6 oraz twierdzenia 4.3.

Uwagi 4.3.

(1) Rysunki 4.1.1–4.1.10 ilustrują obliczanie, za pomocą algorytmu 4.4., współczynników asymptotycznych $\boldsymbol{\eta}, \mathbf{h}$ dla rozkładu stacjonarnego nieprzywiedlnego *PZŁM* indukowanego przez graf obciążony przedstawiony na rys. 4.1.1 (liczby w kółkach oznaczają stany, kolory strzałek — skończone wartości macierzy $\mathbf{D}$, natomiast liczby przy strzałkach — niediagonalne wartości macierzy $\boldsymbol{\Delta}$). Kolory w kółkach na rys. 4.1.2, 4.1.4, 4.1.7 oraz 4.1.10 oznaczają wartości współczynników h_i, natomiast liczby przy kółkach — wartości współczynników η_i $(i = 1, \ldots, 4)$ obliczane na kolejnych etapach agregacji. Na rysunkach 4.1.5 i 4.1.8 przedstawione są odpowiednio macierze $\mathbf{D}^2, \boldsymbol{\Delta}^2$ oraz $\mathbf{D}^3, \boldsymbol{\Delta}^3$ (prostokąt i trójkąt oznaczają zgrupowane stany). Rysunki 4.1.3, 4.1.6, 4.1.9 ilustrują odpowiednio grafy g^1, g^2, g^3 oraz ich klasy zamknięte (ramki wokół stanów).

Rysunki 4.2.1–4.2.11 ilustrują obliczanie współczynnika $\mathbf{h}$ przez algorytm 4.4 dla bardziej skomplikowanego *PZŁM* indukowanego przez macierz $\mathbf{D}$ przedstawioną na rys. 4.2.1.

Rysunek 4.2.12 przedstawia krawędzie występujące w grafie z rysunku 4.2.1, które mogą występować w najkrótszych drzewach.

(2) Rysunki 4.3.1–4.3.8 ilustrują hierarchiczną agregację, wykonywaną w części 2) algorytmu 4.6, grafu $g^*(\mathbf{D})$ przedstawionego na rys. 4.3.1. Rysunek 4.3.9 przedstawia strzałki, które mogą występować w najkrótszych drzewach o korzeniu $\{(1,1)\}$.

Rysunki 4.4.1–4.4.5 ilustrują obliczanie wektora $\mathbf{a}$ w części 3) algorytmu 4.6. Liniami przerywanymi oddzielone są zbiory $M_1 - M_4$ powstające w kolejnych iteracjach pętli "repeat".

(3) Rysunki 4.5.1–4.5.4 ilustrują "skracanie", opisane w dowodzie lematu 4.4, drzewa o korzeniu $\{(1,2)\}$ w grafie $g^*(\mathbf{D})$ z rys. 4.2.1. Na rys. 4.5.2 "skracane" są krawędzie wychodzące ze stanów należących do klas zamkniętych w grafie $g^*_{\min}(\mathbf{D})$— powstały graf ma własności (4.4) i (4.5). Na rys. 4.5.3 przedstawiony jest graf mający własności (4.4)–(4.7). Rysunek 4.5.4 przedstawia graf krótszy od grafu z rys. 4.5.3.

(4) Wyniki tej części pracy są uogólnieniem i rozwinięciem rezultatów:
   — Schweitzera [Sch 1–3], gdzie podano algorytm dla kolejnych wyrazów rozwinięcia rozkładu stacjonarnego liniowo zaburzonego nieprzywiedlnego $\acute{L}M$,
   — Hassima i Haviva [HasHav], gdzie podano algorytm dla rzędów wielkości średnich czasów przejścia między stanami w przypadku liniowo zaburzonej, nieprzywiedlnej macierzy przejścia,
   — Desai i Kumarów [DeKuKu], gdzie podano algorytm dla rzędów wielkości rozkładu stacjonarnego pewnych łańcuchów Markowa zaburzonych potęgowo.

(5) Rochlicek i Willsky [RoWi 1–2] podali algorytmy dla współczynników rozwinięcia rozkładu prawdopodobieństwa w t-krokach dla analitycznie zaburzonych $\acute{L}M$.

5. Algorytmy Monte Carlo generujące łańcuchy Markowa dla całkowania.

5.1. **Oszacowania błędu estymacji całki względem rozkładu stacjonarnego dla odwracalnych łańcuchów Markowa.**

Łańcuch Markowa o laplasjanie $\mathbf{L}$ nazywać będziemy *odwracalnym*, jeśli istnieje rozkład stacjonarny $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)_{i\in S}$ taki, że dla dowolnych $i, j \in S$

$$\pi_i l_{ij} = \pi_j l_{ji}.$$

Łatwo udowodnić, że wartości własne odwracalnego *ŁM* są rzeczywiste. Uporządkujmy je według wzrostu wartości $\lambda_1 = 0 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_s \leq 2$.

Dla dowolnej funkcji rzeczywistej na S, $\mathbf{f} : S \to \mathbb{R}$, przyjmijmy oznaczenia

$$r(\mathbf{f}) := \max_{i\in S} f_i - \min_{i\in S} f_i \quad \text{oraz} \quad \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f} := \sum_{i\in S} f_i\pi_i,$$

gdzie $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)_{i\in S}$ jest rozkładem prawdopodobieństwa na S.

W tym rozdziale rozważać będziemy odwracalne i nieprzywiedlne *ŁM* $X = (X_t)_{t\geq 0}$ z czasem dyskretnym $t \in \mathbb{N}$. Podamy oszacowania błędu $|\bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}|$ estymacji całki $\boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}$ względem rozkładu stacjonarnego $\boldsymbol{\pi}$ za pomocą *średniej po czasie*

$$\bar{f}_t(\omega) := \frac{1}{t}\sum_{j=0}^{t-1} f(X_j(\omega)), \quad \omega \in \Omega.$$

W dalszym ciągu skorzystamy z następującej nierówności, udowodnionej ostatnio przez Dinwoodiego.

Twierdzenie 5.1. *(Dinwoodie [Din 1]) Załóżmy, że funkcja* $\mathbf{f} : S \to \mathbb{R}$ *spełnia nierówności* $0 \leq \mathbf{f} \leq 1$. *Wtedy dla każdego* $\delta \in [0, (8\lambda_2 + 16)^{-3}]$ *oraz* $i \in S$,

$$\mathbf{Pr}_i\left\{\bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f} \geq \delta\right\} \leq \left[1 + \frac{9\delta(\lambda_2 + 2)}{\sqrt{\pi_i}}\right]\exp(-t\lambda_2\delta^2/2).$$

Poniższy wniosek i następujące po nim dwa stwierdzenia podają kolejno:

- oszacowanie na prawdopodobieństwo błędu większego lub równego δ;
- oszacowanie błędu dla prawie wszystkich trajektorii przy dostatecznie dużym t;
- oszacowanie błędu w normie L_p.

Wniosek 5.1. *Dla dowolnej funkcji* $\mathbf{f}$, $\delta \in [0, r(\mathbf{f})(8\lambda_2 + 16)^{-3}]$, $i \in S$ *oraz* $t = 1, 2, \ldots$

$$\mathbf{Pr}_i\left\{\left|\bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}\right| \geq \delta\right\} \leq C(\pi_i)\exp[-t\lambda_2\delta^2/(2r^2(\mathbf{f}))],$$

gdzie $C(\pi_i) := 2\left(1 + 36/\sqrt{\pi_i}\right)$.

Dowód. Oczywiście

$$1 + \frac{9\delta(\lambda_2 + 2)}{\sqrt{\pi_i}} \leq \frac{C(\pi_i)}{2}.$$

Z twierdzenia 5.1 wynika, że dla $\delta \in [0, r(\mathbf{f})(8\lambda_2 + 16)^{-3}]$ mamy

$$\begin{aligned}\mathbf{Pr}_i\left\{\bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f} \geq \delta\right\} &= \mathbf{Pr}_i\left\{\frac{\bar{f}_t}{r(\mathbf{f})} - \frac{\boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}}{r(\mathbf{f})} \geq \frac{\delta}{r(\mathbf{f})}\right\} \\ &\leq \frac{C(\pi_i)}{2}\exp[-t\lambda_2\delta^2/(2r^2(\mathbf{f}))].\end{aligned}$$

Podobnie

$$\begin{aligned}\mathbf{Pr}_i\left\{\bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f} \leq -\delta\right\} &= \mathbf{Pr}_i\left\{\frac{\bar{f}_t}{r(\mathbf{f})} - \frac{\boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}}{r(\mathbf{f})} \geq -\frac{\delta}{r(\mathbf{f})}\right\} \\ &= \mathbf{Pr}_i\left\{\left(1 - \frac{\bar{f}_t}{r(\mathbf{f})}\right) - \left(1 - \frac{\boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}}{r(\mathbf{f})}\right) \geq \frac{\delta}{r(\mathbf{f})}\right\} \\ &\leq \frac{C(\pi_i)}{2}\exp[-t\lambda_2\delta^2/(2r^2(\mathbf{f}))].\end{aligned}$$

W rezultacie z addytywności prawdopodobieństwa wynika teza. □

Stwierdzenie 5.1.

$$\mathbf{Pr}\left\{\limsup_t \sqrt{\frac{t}{\log t}}\left|\bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}\right| \leq \sqrt{\frac{2r^2(\mathbf{f})}{\lambda_2}}\right\} = 1.$$

Dowód. Łatwo zauważyć, że dla ustalonego $a > 1$ oraz dla dostatecznie dużych $t \in \mathbb{N}$

$$\sqrt{\frac{\log t}{t}} < \sqrt{\frac{\lambda_2}{2a}}(8\lambda_2 + 16)^{-3}. \tag{5.1}$$

Niech t_0 będzie najmniejszą liczbą naturalną, dla której spełniona jest ta nierówność. Niech ponadto dla $t \geq t_0$

$$\delta(t) := \sqrt{\frac{2ar^2(\mathbf{f}) \log t}{t\lambda_2}}.$$

Wtedy ze wzoru (5.1) wynika, że

$$\begin{cases} \delta(t) < r(\mathbf{f})(8\lambda_2 + 16)^{-3} \\ \exp[-t\lambda_2\delta^2(t)/(2r^2(\mathbf{f}))] = t^{-a}. \end{cases} \tag{5.2}$$

Przyjmijmy

$$A(t,a) := \left\{ \omega \in \Omega : \ \left| \bar{f}_t(\omega) - \boldsymbol{\pi}^T \mathbf{f} \right| \geq \sqrt{\frac{2ar^2(\mathbf{f}) \log t}{t\lambda_2}} \right\}$$

Wtedy z wniosku 5.1 oraz z (5.2) wynika, że dla dowolnego $i \in S$ oraz $t \geq t_0$

$$\mathbf{Pr}_i\{A(t,a)\} \leq C(\pi_i) t^{-a}.$$

Zatem $\sum_{t \geq t_0} \mathbf{Pr}_i\{A(t,a)\} < \infty$. W rezultacie z lematu Borela–Cantelli'ego otrzymujemy

$$\mathbf{Pr}_i\{\exists_{T \geq 0} \, \forall_{t \geq T} \, A^C(t,a)\} = 1,$$

gdzie $A^C(t,a) = \Omega \setminus A(t,a)$. Ponieważ każdy rozkład prawdopodobieństwa $\mathbf{Pr}$ jest kombinacją wypukłą rozkładów warunkowych $(\mathbf{Pr}_i)_{i \in S}$, więc również

$$\mathbf{Pr}\{\exists_{T \geq 0} \, \forall_{t \geq T} \, A^C(t,a)\} = 1.$$

Wobec dowolności $a > 1$ otrzymujemy tezę. □

Stwierdzenie 5.2. *Dla dowolnych $i \in S$, $p > 0$, $t = 1, 2, \ldots$*

$$\left(\mathbf{E}_i \left| \bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T \mathbf{f} \right|^p\right)^{1/p} \leq C(p, \pi_i, r(\mathbf{f}))/\sqrt{\lambda_2 t},$$

gdzie stała $C(p, \pi_i, r(\mathbf{f}))$ jest zdefiniowana w dowodzie.

Dowód. Niech Y będzie dowolną zmienną losową na przestrzeni $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{Pr})$. Załóżmy, że $\mathbf{E}|Y|^p < \infty$. Wtedy dla $p > 0$ zachodzi następująca tożsamość (patrz np. [Pe] wzór 2.34)

$$\mathbf{E}|Y|^p = p \int_0^\infty \delta^{p-1} \mathbf{Pr}\{|Y| \geq \delta\} d\delta. \tag{5.3}$$

Przyjmijmy

$$b := t\lambda_2/(2r^2(\mathbf{f})), \qquad \delta_0 := \sqrt{\ln C(\pi_i)/b}, \qquad \delta_1 := r(\mathbf{f})/32^3.$$

Ponieważ $\delta_1 < r(\mathbf{f})(8\lambda_2 + 16)^{-3}$, więc z wniosku 5.1 otrzymujemy

$$\mathbf{Pr}\left\{\left|\bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}\right| \geq \delta\right\} \leq \begin{cases} 1 & \text{dla } 0 \leq \delta \leq \delta_0 \\ C(\pi_i)e^{-b\delta^2} & \text{dla } \delta_0 \leq \delta \leq \delta_1 \\ C(\pi_i)e^{-b\delta_1^2} & \text{dla } \delta_1 \leq \delta \leq r(\mathbf{f}) \\ 0 & \text{dla } r(\mathbf{f}) \leq \delta. \end{cases} \tag{5.4}$$

Zatem ze wzorów (5.3) i (5.4) wynika, że

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_i\left|\bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}\right|^p &= p \int_0^\infty \delta^{p-1} \mathbf{Pr}\left\{\left|\bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}\right| \geq \delta\right\} d\delta \\ &\leq \left(\frac{\ln C(\pi_i)}{b}\right)^{p/2} + p \int_{\delta_0}^{\delta_1} \delta^{p-1} C(\pi_i) e^{-b\delta^2} d\delta + C(\pi_i)(r^p(\mathbf{f}) - \delta_1^p)e^{-b\delta_1^2}. \end{aligned}$$

Oszacujemy teraz całkę występującą po prawej stronie ostatniej nierówności.

$$\begin{aligned} p \int_{\delta_0}^{\delta_1} \delta^{p-1} C(\pi_i) e^{-b\delta^2} d\delta &= \frac{C(\pi_i)p}{2b^{p/2}} \int_{b\delta_0^2}^{b\delta_1^2} u^{p/2-1} e^{-u} du \\ &\leq \frac{C(\pi_i)p}{2b^{p/2}} \left(\Gamma\left(\frac{p}{2}\right) - \Gamma\left(\frac{p}{2}, b\delta_0^2\right)\right), \end{aligned}$$

gdzie $\Gamma(r, x)$ oznacza uciętą funkcję gamma, czyli

$$\Gamma(r, x) = \int_0^x u^{r-1} e^{-u} du, \qquad r > 0, \qquad x > 0.$$

Przyjmijmy oznaczenia

$$\begin{aligned} C_1(p, \pi_i) &:= \frac{C(\pi_i)p}{2} \left[\Gamma\left(\frac{p}{2}\right) - \Gamma\left(\frac{p}{2}, \sqrt{\ln C(\pi_i)}\right)\right] + (\ln C(\pi_i))^{p/2}, \\ C_2(p, \pi_i, r(\mathbf{f})) &:= C(\pi_i) r^p(\mathbf{f})(1 - 32^{-3p}). \end{aligned}$$

Wtedy

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_i\left|\bar{f}_t - \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}\right|^p &\le C_1(p,\pi_i)b^{-p/2} + C_2(p,\pi_i,r(\mathbf{f}))e^{-b\delta_1^2}\\ &= b^{-p/2}\left[C_1(p,\pi_i) + C_2(p,\pi_i,r(\mathbf{f}))b^{p/2}e^{-b\delta_1^2}\right]\\ &\le b^{-p/2}\left[C_1(p,\pi_i) + C_2(p,\pi_i,r(\mathbf{f}))\left(\frac{p}{2}e^{-\delta_1^2}\right)^{p/2}\right].\end{aligned}$$

W rezultacie, po podstawieniu

$$C(p,\pi_i,r(\mathbf{f})) := \sqrt{2}r(\mathbf{f})\left\{C_1(p,\pi_i) + C_2(p,\pi_i,r(\mathbf{f}))\left[\frac{p}{2}\exp(-r^2(\mathbf{f})32^{-6})\right]^{p/2}\right\}^{1/p},$$

otrzymujemy tezę. □

Uwaga 5.1.

Nierówności wykładnicze dla specjalnych odwracalnych *ŁM* podane są w pracach [Gil], [Ka]. Ostatnio Dinwoodie udowodnił jeszcze jedną nierówność podobną do twierdzenia 5.1 [Din 2].

5.2. **Oszacowania błędu estymacji całki dla Θ-potęgowo zaburzonych, odwracalnych łańcuchów Markowa.**

W tej części zdefiniujemy rodzinę *ŁM* zawierającą rodzinę *PZŁM* rozważaną w rozdziale 4., a następnie udowodnimy dla niej oszacowania błędu estymacji całki względem rozkładu stacjonarnego za pomocą średniej po czasie.

Rodzinę laplasjanów Markowa $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ rzędu $s \times s$ nazywać będziemy Θ-*potęgowo zaburzonym łańcuchem Markowa* (Θ*PZŁM*), jeżeli istnieją liczby $c_0, c_1 > 0$ oraz macierz $\mathbf{D} = (d_{ij})_{i,j\in S}$ takie, że dla dowolnych $i, j \in S$, $i \neq j$, $d_{ij} \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ oraz

$$c_0\varepsilon^{d_{ij}} \le -l_{ij}(\varepsilon) \le c_1\varepsilon^{d_{ij}} \quad (\varepsilon^\infty := 0).$$

Łatwo udowodnić dla rodziny Θ*PZŁM* stwierdzenia podobne do stwierdzeń 4.1–4.3. Ponadto charakterystyki Θ*PZŁM* można oszacować korzystając z twierdzeń

3.1–3.4. Na przykład dla rozkładu stacjonarnego nieprzywiedlnego $\Theta PZ\L M$ prawdziwe są nierówności:

$$\left(\frac{c_0}{c_1}\right)^{s-1} \varepsilon^{h_i} \le \pi_i(\varepsilon) \le \left(\frac{c_1}{c_0}\right)^{s-1} \varepsilon^{h_i}. \tag{5.5}$$

Przypomnijmy, że dla dowolnego lasu f oraz rodziny lasów F w grafie $g^*(\mathbf{D})$

$$d(f) := \sum_{(i,j)\in f} d_{ij}, \qquad d(F) = \min_{f\in F} d(f)$$

oraz dla $k = 1, \dots, s$

$$F^k := \bigcup_{\substack{R\subseteq S \\ |R|=k}} F(R).$$

Przyjmijmy ponadto

$$v_k := d(F^{k-1}) - d(F^k).$$

Twierdzenie 5.2. *Niech $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ będzie rodziną $\Theta PZ\L M$ zadaną przez macierz $\mathbf{D}$ o rzeczywistych wartościach własnych. Wtedy dla $k = 2, \dots, s$*

$$\binom{s-1}{k-2}^{-1}\binom{s}{k}^{-1} k s^{s-k-1} c_0^{s-k+1} c_1^{k-s} \varepsilon^{v_k} \le \lambda_k(\varepsilon)$$

oraz

$$\lambda_k(\varepsilon) \le \binom{s-1}{k-1}\binom{s}{k-1}(k-1) s^{s-k} c_0^{k-s} c_1^{s-k+1} \varepsilon^{v_k}.$$

Dowód. Z założenia i wniosku 2.4 wynika, że dla $k = 2, \dots, s$ oraz $\varepsilon \in (0,\varepsilon_1)$

$$c_0^{s-k}\varepsilon^{d(F^k)} \le w(F^k)(\varepsilon) \le \binom{s}{k} k s^{s-k-1} c_1^{s-k} \varepsilon^{d(F^k)},$$

Stąd i z twierdzenia 2.6 wynika teza. □

Głównym rezultatem tego rozdziału jest następujące twierdzenie.

Twierdzenie 5.3. *Niech $\{\mathbf{L}(\varepsilon),\ \varepsilon \in (0,\varepsilon_1)\}$ będzie rodziną nieprzywiedlnych i odwracalnych $\Theta PZ\L M$ wyznaczoną przez macierz $\mathbf{D}$ i stałe c_0, c_1. Niech $\boldsymbol{\pi}(\varepsilon)$ będzie rozkładem stacjonarnym ŁM o laplasjanie $\mathbf{L}(\varepsilon)$. Niech ponadto $\mathbf{f} : S \to \mathbb{R}$. Wtedy:*
(1) *dla $\delta \in \left[0, r(\mathbf{f})(8C_1(c_0,c_1)\varepsilon^{v_2(\mathbf{D})} + 16)^{-3}\right]$*

$$\mathbf{Pr}_i^\varepsilon\{|\bar{f}_t^\varepsilon - \boldsymbol{\pi}^T(\varepsilon)\mathbf{f}| \ge \delta\} \le C\left((c_0/c_1)^{s-1}\varepsilon^{h_i(\mathbf{D})}\right)\exp\left[-tC_0(c_0,c_1)\varepsilon^{-v_2(\mathbf{D})}\delta^2/(2r^2(\mathbf{f}))\right];$$

$$\mathbf{Pr}_i^{\varepsilon}\left\{\limsup_{t\to\infty}\sqrt{\frac{t}{\log t}}|\bar{f}_t^{\varepsilon}-\boldsymbol{\pi}^T(\varepsilon)\mathbf{f}|\le\sqrt{\frac{2r^2(\mathbf{f})}{C_0(c_0,c_1)\varepsilon^{v_2(\mathbf{D})}}}\right\}=1; \tag{2}$$

$$\left(\mathbf{E}_i^{\varepsilon}|\bar{f}_t^{\varepsilon}-\boldsymbol{\pi}^T(\varepsilon)\mathbf{f}|^p\right)^{1/p}\le C\left(p,(c_0/c_1)^{s-1}\varepsilon^{h_i(\mathbf{D})},r(\mathbf{f})\right)/\sqrt{tC_0(c_0,c_1)\varepsilon^{v_2(\mathbf{D})}}, \tag{3}$$

gdzie wszystkie stałe są zdefiniowane w dowodzie.

Dowód. Niech $\lambda_2(\varepsilon)$ będzie drugą wartością własną laplasjanu $\mathbf{L}(\varepsilon)$. Wtedy z twierdzenia 5.2 otrzymujemy

$$\lambda_2(\varepsilon)\ge C_0(c_0,c_1)\varepsilon^{v_2(\mathbf{D})}, \tag{5.6}$$

gdzie

$$C_0(c_0,c_1):=4(s-1)^{-1}s^{s-4}c_0^{s-1}c_1^{2-s}$$

oraz

$$\lambda_2(\varepsilon)\le C_1(c_0,c_1)\varepsilon^{v_2(\mathbf{D})}, \tag{5.7}$$

gdzie

$$C_1(c_0,c_1):=(s-1)s^{s-1}c_0^{2-s}c_1^{s-1}.$$

Część (1) twierdzenia wynika z (5.5), (5.6), (5.7) oraz wniosku 5.1. Część (2) wynika z (5.6) oraz stwierdzenia 5.1. Część (3) wynika z (5.5), (5.6) oraz stwierdzenia 5.2. □

Uwagi 5.2.

(1) Twierdzenie 5.2 jest podobne do wyniku Wentzlla [We], gdzie rozważana jest większa rodzina zaburzonych łańcuchów Markowa niż $\Theta PZ\Lambda M$. Jednak teza jest tam mniej dokładna. Wentzell podał bez dowodu lemat równoważny lematowi 2.2 (1).

(2) Główne twierdzenie tego rozdziału (twierdzenie 5.3) podaje oszacowanie błędów estymacji całki za pomocą średniej po trajektorii dla $\Theta PZ\Lambda M$. Głównymi zaletami tych oszacowań są:
   (a) duża ogólność (wydaje się, że jest to pierwsze twierdzenie tego rodzaju);
   (b) jawna zależność oszacowania od parametrów $\Theta PZ\Lambda M$ oraz od ε i t.

5.3. **Oszacowania błędu dla algorytmów Metropolisa–Hastingsa oraz próbnika Gibbsa.**

W tej części rozdziału rozważać będziemy algorytmy dla oszacowania całki funkcji $\mathbf{f}: S \to R$ względem rozkładu prawdopodobieństwa $\boldsymbol{\pi} = (\pi_i)_{i\in S}$, w przypadku, gdy $\pi_i > 0$ dla dowolnego $i \in S$. Algorytmy te generują nieprzywiedlne i odwracalne *ŁM* o rozkładzie stacjonarnym $\boldsymbol{\pi}$. Średnia po czasie $\bar{f}_t$ takich *ŁM* jest naturalnym oszacowaniem $\boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}$. Z twierdzenia ergodycznego wynika bowiem, że

$$\mathbf{Pr}\left\{\lim_{t\to\infty} \bar{f}_t = \boldsymbol{\pi}^T\mathbf{f}\right\} = 1.$$

Zanim przejdziemy do omawiania dalszych własności $\bar{f}_t$, podamy kilka definicji.

Dla danej funkcji $G: [0,1] \to [0,1]$ zdefiniujemy jej rozszerzenie $G^*: \mathbb{R}^+ \to [0,1]$ w następujący sposób:

$$G^*(x) := \begin{cases} G(x) & \text{dla } 0 \le x \le 1 \\ xG(x^{-1}) & \text{dla } x > 1. \end{cases}$$

Macierz $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j\in S}$ nazywać będziemy *strukturalnie symetryczną*, jeżeli dla dowolnych $i, j \in S$ spełniony jest następujący warunek

$$a_{ij} \neq 0 \Longleftrightarrow a_{ji} \neq 0.$$

Dla dowolnych $i, j \in S$ przyjmiemy $N_i(\mathbf{A}) := \{i\} \cup \{j \in S : \ a_{ij} \neq 0\}$ oraz $N_{ij}(\mathbf{A}) := N_i(\mathbf{A}) \cap N_j(\mathbf{A})$.

Laplasjan Markowa $\mathbf{L}(\boldsymbol{\pi}) = (l_{ij})_{i,j\in S}$ o rozkładzie stacjonarnym $\boldsymbol{\pi}$ nazywać będziemy *laplasjanem Metropolisa–Hastingsa*, jeżeli istnieją: nieprzywiedlna i strukturalnie symetryczna macierz przejścia $\mathbf{Q} = (q_{ij})_{i,j\in S}$ oraz funkcja $G: [0,1] \to [0,1]$ o następujących własnościach:

$$G(x) = 0 \Longleftrightarrow x = 0, \tag{5.8}$$

$$G(x) \le x, \tag{5.9}$$

$$m(G) := \inf_{x>0} \frac{G(x)}{x} > 0, \tag{5.10}$$

takie, że dla $i, j \in S$, $i \neq j$

$$-l_{ij} = q_{ij} G^*\left(\frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}}\right). \tag{5.11}$$

Jeżeli w powyższej definicji warunek (5.11) można zastąpić warunkiem

$$-l_{ij} = q_{ij} G^* \left(\frac{q_{ji}}{q_{ij}} \right) \frac{\pi_j}{\sum_{N_{ij}(\mathbf{Q})} \pi_k} \quad \text{dla } i, j \in S,\ i \neq j, \tag{5.12}$$

to laplasjan $\mathbf{L}(\boldsymbol{\pi})$ nazywać będziemy *laplasjanem Gibbsa*.

Łańcuchem Metropolisa– Hastingsa (*ŁMH*) nazywać będziemy *ŁM*, którego laplasjan jest laplasjanem Metropolisa–Hastingsa. Podobnie *łańcuchem Gibbsa* (*ŁG*) nazywać będziemy *ŁM*, którego laplasjan jest laplasjanem Gibbsa.

W dalszym ciągu utożsamiać będziemy *ŁM* z algorytmem, który go generuje.

Poniższy przykład podaje najbardziej znane *ŁMH*.

Przykład 5.1.

(1) Algorytm Metropolisa [Me et al.], [So], [Wel]:

$$G_M^*(x) := x \wedge 1;$$

(2) Algorytm Barkera [Wel]:

$$G_B^*(x) := x/(1+x);$$

(3) Algorytm Hastingsa: [So], [Wel] dla $a, b \geq 1$

$$G_{ab}^*(x) := \frac{1 + a[a^{-1}(x^{-1} \wedge x)]^b}{1 + x^{-1}}.$$

Łatwo zauważyć, że $G_{a1}^* \equiv G_M^*$ oraz $G_{a\infty}^* \equiv G_B^*$.

Bezpośrednio z definicji wynikają następujące stwierdzenia.

Stwierdzenie 5.3. *Jeżeli funkcja* $G:\ [0,1] \to [0,1]$ *spełnia warunek* (5.8) *i* (5.9), *to*

$$G^*(x) \leq G_M^*(x) \quad \textit{dla } x \in \mathbb{R}^+.$$

Jeżeli dodatkowo funkcja G *spełnia warunek* (5.10), *to*

$$m(G) G_M^*(x) \leq G^*(x) \quad \textit{dla } x \in \mathbb{R}^+.$$

Kolejne stwierdzenie charakteryzuje dopuszczalne funkcje G wśród funkcji ciągłych.

Stwierdzenie 5.4. *Załóżmy, że funkcja* $G:\ [0,1] \to [0,1]$ *spełnia warunek* (5.8), (5.9) *oraz jest ciągła. Wtedy następujące warunki są równoważne:*

$$m(G) > 0, \tag{1}$$

$$\liminf_{x \to 0} \frac{G(x)}{x} > 0. \tag{2}$$

Stwierdzenie 5.5. *Jeżeli ŁM o laplasjanie* $\mathbf{L}(\boldsymbol{\pi})$ *jest ŁMH lub ŁG, to jest nieprzywiedlnym i odwracalnym ŁM o rozkładzie stacjonarnym* $\boldsymbol{\pi}$.

Dla dowolnej funkcji $\mathbf{u}:\ S \to \mathbb{R}$ oraz liczby $\tau > 0$ przyjmijmy

$$\boldsymbol{\pi}(\tau, \mathbf{u}) := (\pi_i(\tau, \mathbf{u}))_{i \in S},$$

gdzie dla $i \in S$

$$\pi_i(\tau, \mathbf{u}) := \frac{\exp(-u_i/\tau)}{\sum_{j \in S} \exp(-u_j/\tau)}.$$

Rozkład prawdopodobieństwa $\boldsymbol{\pi}(\tau, \mathbf{u})$ nazywać będziemy *rozkładem Gibbsa o potencjale* $\mathbf{u}$ *i temperaturze* τ.

Przyjmijmy dla danej macierzy $\mathbf{Q} = (q_{ij})_{i,j \in S}$ oraz funkcji $G:\ [0,1] \to [0,1]$

$$q_0 := \min_{\substack{i \neq j \\ q_{ij} > 0}} q_{ij}, \quad q_1 := \max_{i \neq j} q_{ij}, \quad N(\mathbf{Q}) := \max_{i \neq j} |N_{ij}(\mathbf{Q})|, \quad u_{ij}(\mathbf{Q}) := \min_{k \in N_{ij}(\mathbf{Q})} u_k.$$

Stwierdzenie 5.6. *Niech* $\mathcal{L}(\mathbf{u}) := \{\mathbf{L}(\boldsymbol{\pi}(\tau, \mathbf{u})),\ \tau > 0\}$ *będzie rodziną laplasjanów ŁMH określoną przez macierz* $\mathbf{Q}$ *i funkcję* G. *Wtedy*

$$c_0 \exp(-d_{ij}/\tau) \leq -l_{ij}(\tau, \mathbf{u}) \leq c_1 \exp(-d_{ij}/\tau),$$

gdzie

$$c_0 := m(G) q_0; \quad c_1 := q_1; \ \textit{oraz dla } i \neq j \quad d_{ij} := \begin{cases} (u_j - u_i) \vee 0 & \textit{jeśli } q_{ij} > 0 \\ \infty & \textit{jeśli } q_{ij} = 0. \end{cases}$$

W szczególności $\mathcal{L}(\mathbf{u})$ *jest* $\Theta PZŁM$ *przy konwencji* $\varepsilon := \exp(-1/\tau)$.

Dowód. Przyjmijmy dla prostoty $\pi_i := \pi_i(\tau, \mathbf{u})$ oraz załóżmy, że $q_{ij} > 0$. Wtedy ze stwierdzenia 5.3 otrzymujemy:

$$\begin{aligned} q_{ij} G^* \left(\frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}} \right) &\geq q_{ij} m(G) G_M^* \left(\frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}} \right) \\ &= m(G) \left(\frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i} \wedge q_{ij} \right) \geq m(G) q_0 \left(\frac{\pi_j}{\pi_i} \wedge 1 \right). \end{aligned}$$

Ponadto

$$\begin{aligned} q_{ij} G^* \left(\frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}} \right) &\leq q_{ij} G_M^* \left(\frac{\pi_j q_{ji}}{\pi_i q_{ij}} \right) \\ &\leq q_1 \left(\frac{\pi_j}{\pi_i} \wedge 1 \right). \end{aligned}$$

Stąd wynika teza. □

Stwierdzenie 5.7. *Niech* $\mathcal{L}(\mathbf{u}) := \{\mathbf{L}(\boldsymbol{\pi}(\tau, \mathbf{u})),\ \tau > 0\}$ *będzie rodziną laplasjanów ŁG określoną przez macierz* $\mathbf{Q}$ *i funkcję* G*. Wtedy*

$$c_0 \exp(-d_{ij}/\tau) \leq l_{ij}(\tau, \mathbf{u}) \leq c_1 \varepsilon \exp(-d_{ij}/\tau),$$

gdzie

$$c_0 := \frac{m(G) q_0}{N(\mathbf{Q})}; \quad c_1 := q_1; \ \textit{oraz dla } i \neq j \quad d_{ij} := \begin{cases} (u_j - u_{ij}(\mathbf{Q})) & \textit{jeśli } q_{ij} > 0 \\ \infty & \textit{jeśli } q_{ij} = 0. \end{cases}$$

W szczególności $\mathcal{L}(\mathbf{u})$ *jest* $\Theta PZŁM$ *przy konwencji* $\varepsilon := \exp(-1/\tau)$.

Dowód. Przyjmijmy dla wygody $\pi_i := \pi_i(\tau, \mathbf{u})$ oraz załóżmy, że $q_{ij} > 0$. Wtedy ze stwierdzenia 5.3 otrzymujemy:

$$q_{ij} G^* \left(\frac{q_{ji}}{q_{ij}} \right) \geq q_{ij} m(G) G_M^* \left(\frac{q_{ji}}{q_{ij}} \right) = m(G) \left(q_{ji} \wedge q_{ij} \right) \geq \frac{m(G) q_0}{N(\mathbf{Q})}.$$

Ponadto

$$q_{ij} G^* \left(\frac{q_{ji}}{q_{ij}} \right) \leq q_{ji} \wedge q_{ij} \leq q_1.$$

Stąd wynika teza. □

Z dowodu twierdzenia 5.7 [ChiCho 4] wynika następujące twierdzenie.

Twierdzenie 5.4. *(Chiang–Chow [ChiCho 4]) Niech dane będą* $\mathbf{u}: S \to \mathbb{R}$ *oraz* $\tau > 0$. *Niech* $\mathbf{L}^1(\boldsymbol{\pi}(\tau, \mathbf{u}))$, $\mathbf{L}^2(\boldsymbol{\pi}(\tau, \mathbf{u}))$ *będą laplasjanami ŁMH lub ŁG o macierzach* $\mathbf{Q}_1$ *i* $\mathbf{Q}_2$ *takich, że* $g(\mathbf{Q}_1) = g(\mathbf{Q}_2)$. *Wtedy dla* $k = 1, \ldots, s$

$$v_k^1 = v_k^2.$$

Z twierdzenia 5.4 wynika, że dla *ŁMH* lub *ŁG* o tym samym grafie $g = g(\mathbf{Q})$ oraz rozkładzie prawdopodbieństwa $\boldsymbol{\pi}(\tau, \mathbf{u})$, współczynniki $v_k\big(\mathbf{L}(\boldsymbol{\pi}(\tau, \mathbf{u})), \mathbf{Q}, G\big)$ są stałe i zależą tylko od $\mathbf{u}, k$ oraz g.

Uwagi 5.3.

(1) Chiang i Chow [ChiCho 4] udowodnili równość współczynników v_k dla algorytmu Metropolisa i próbnika Gibbsa w przypadku szczególnej struktury $g^*(\mathbf{D})$. Ingrassia [In] oszacował $\lambda_2(\varepsilon)$ dla algorytmu Metropolisa i próbnika Gibbsa przy podobnych założeniach o $g^*(\mathbf{D})$ za pomocą nierówności Poincare'go [Dist], [Fi], DiS–C], [Si], [Al 3]. W porównaniu z nierównościami Ingrassi, twierdzenie 5.2 daje słabsze stałe dla λ_2, jednak pozwala oszacować wszystkie wartości własne. Ponadto stwierdzenia 5.6 i 5.7 pozwalają uogólnić rezultaty Ingrassi oraz Chianga i Chowa na dużą, nieparametryczną rodzinę algorytmów, zawierającą rodzinę wprowadzoną przez Hastingsa [Gi], [So], [Wel].

(2) Twierdzenie 5.3 razem ze stwierdzeniami 5.6 i 5.7 potwierdzają doświadczenie numeryczne wskazujące na podobną efektywność algorytmu Metropolisa i próbnika Gibbsa dla niskich temperatur.

(3) Algorytm Metropolisa i próbnik Gibbsa są używane od ponad 40 lat w modelach mechaniki statystycznej (np. model Isinga, model Pottsa, Random Cluster Model) do estymacji globalnych charakterystyk złożonych układów fizycznych (patrz np. [Me et al.], [So], [Gi], [Wel]). Pomimo dużego doświadczenia praktycznego, niewiele wiadomo o zachowaniu tych algorytmów "w czasie skończonym".

Jerrum i Sinclair w pracy [JeSi] skonstruowali modyfikację algorytmu Metropolisa dla pewnych modeli Isinga oraz udowodnili, że koszt tego algorytmu jest ograniczony przez logarytmiczną funkcję liczności zbioru stanów — s, dokładności — δ, poziomu ufności — α (por. [Je], [Wel]).

Dyer, Frieze i Kannan [DyFriKa] skonstruowali modyfikację algorytmu Metropolisa dla szacowania objętości zbiorów zwartych i wypukłych w $\mathbb{R}^d$ oraz udowodnili, że koszt tego algorytmu jest ograniczony przez wielomianową funkcję d, δ, α (por. [Al 1–2], [ApKa], [DyFri], [FriKaPo], [Ka], [Je], [Wel]). Praca Tierneya [Ti] jest przeglądem wyników teoretycznych oraz zastosowań próbnika Gibbsa do oszacowania całek w statystyce bayesowskiej.

6. Algorytmy Monte Carlo generujące łańcuchy Markowa dla poszukiwania minimum globalnego.

6.1. **Niejednorodne łańcuchy Markowa. Podstawowe definicje i stwierdzenia.**

Niech $(X_t)_{t\geq 0}$ będzie niejednorodnym łańcuchem Markowa z czasem dyskretnym, określonym na przestrzeni $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{Pr})$ o wartościach w zbiorze $S = \{1, 2, \ldots, s\}$. Zakładać będziemy, że dla dowolnego stanu $i \in S$, $\mathbf{Pr}\{X_0 = i\} > 0$. Nie jest to warunek istotnie ograniczający rezultaty podane w tym rozdziale a ponadto znacznie ułatwia rozumowanie.

Dla dowolnych $A \subseteq S$, $j \in A$ przyjmijmy oznaczenia:

$$\{A \text{ ult.}\} := \{\omega \in \Omega : \exists_{N\geq 0}\forall_{t\geq N} X_t(\omega) \in A\},$$
$$\{A \text{ i. o.}\} := \{\omega \in \Omega : \forall_{N\geq 0}\exists_{t\geq N} X_t(\omega) \in A\},$$
$$\{j \text{ i. o.}\} := \{\{j\} \text{ i. o.}\}.$$

Oczywiście $\{A \text{ ult.}\}, \{A \text{ i. o.}\} \in \mathcal{F}$.

Stan $j \in S$ nazywać będziemy *powracającym*, jeżeli $\mathbf{Pr}\{j \text{ i. o.}\} > 0$. W przeciwnym przypadku stan j nazywać będziemy *chwilowym*. Łatwo zauważyć, że powyższa definicja jest równoważna definicji podanej w rozdziale 2., jeżeli łańcuch Markowa jest jednorodny. Wówczas prawdziwe jest także twierdzenie, że stan jest powracający wtedy i tylko wtedy, gdy jest istotny.

W przypadku niejednorodnych łańcuchów Markowa macierz przejścia zmienia się w czasie — zatem może zmieniać się również graf indukowany przez tę macierz. Podamy teraz przykład, który pokazuje, że stan może być powracający i nie być istotny nawet wtedy, kiedy graf indukowany przez macierz przejścia nie zmienia się w czasie.

Przykład 6.1. Niech $S = \{1, 2\}$ oraz, dla dowolnego $t \geq 1$, $\mathbf{Pr}\{X_{t+1} = 1 \big| X_t = 1\} = 1$ i $\mathbf{Pr}\{X_{t+1} = 2 \big| X_t = 2\} = 1-(1/t)^2$. Jest oczywiste, że jeśli $\mathbf{Pr}\{X_0 = 2\} > 0$, to 2 będzie stanem powracającym, chociaż nie jest stanem istotnym w żadnym z grafów generowanych przez macierz przejścia.

Klasą asymptotycznie zamkniętą niejednorodnego łańcucha Markowa nazywać będziemy podzbiór R przestrzeni stanów S o następujących własnościach:

(1) $\{R \text{ i. o.}\} \neq \emptyset$ p. n. (*istotność*);
(2) $\{R \text{ i. o.}\} = \{R \text{ ult.}\}$ p. n. (*rozdzielanie trajektorii*);
(3) *R jest minimalnym w sensie inkluzji podzbiorem S spełniającym warunki* (1) *i* (2).

Poniższe stwierdzenie pokazuje, że tak zdefiniowane klasy asymptotycznie zamknięte niejednorodnych *ŁM* mają zasadniczą własność klas zamkniętych jednorodnych *ŁM*: każda trajektoria $\omega \in \Omega$ "wpadnie", prawie na pewno, do jednej z klas asymptotycznie zamkniętych i już jej nie "opuści".

Stwierdzenie 6.1. *Niech $R_1, \ldots, R_m$ będą wszystkimi klasami asymptotycznie zamkniętymi niejednorodnego łańcucha Markowa na S. Niech ponadto $T := S \setminus \bigcup_{i \leq m} R_i$. Wtedy:*

(1) *$m \geq 1$;*
(2) *Zbiory $R_1, \ldots, R_m, T$ tworzą podział przestrzeni stanów S;*
(3) *$\{T \text{ i. o.}\} = \emptyset$ p. n.;*
(4) *$\{R_1 \text{ ult.}\} \cup \ldots \cup \{R_m \text{ ult.}\} = \Omega$ p. n..*

Dowód. (1) Wynika z tego, że S spełnia warunki (1) i (2) definicji klasy asymptotycznie zamkniętej.
(2) Załóżmy dla sprzeczności, że istnieją dwie klasy asymptotycznie zamknięte R_1, R_2 takie, że $R := R_1 \cap R_2 \neq \emptyset$. Są teraz dwie możliwości:
(a) Jeśli $\{R \text{ i. o.}\} = \emptyset$ p. n., to

$$\{R_1 \setminus R \text{ i. o.}\} \subseteq \{R_1 \text{ i. o.}\} = \{R_1 \text{ ult.}\}$$
$$= \{R_1 \text{ ult.}, R_1 \setminus R \text{ ult.}\} \cup \{R_1 \text{ ult.}, R \text{ i. o.}\} = \{R_1 \setminus R \text{ ult.}\} \subseteq \{R_1 \setminus R \text{ i. o.}\} \text{ p. n.}$$

Ale $\{R_1 \text{ i. o.}\} \neq \emptyset$ p. n.. Stąd $R_1 \setminus R$ jest zbiorem istotnym oraz rozdziela trajektorie, co jest sprzeczne z założeniem o R_1.
(b) Jeśli $\{R \text{ i. o.}\} \neq \emptyset$ p. n., to

$$\{R \text{ ult.}\} \subseteq \{R \text{ i. o.}\} \subseteq \{R_1 \text{ i. o.}, R_2 \text{ i. o.}\} = \{R_1 \text{ ult.}, R_2 \text{ ult.}\} = \{R \text{ ult.}\} \text{ p. n.}$$

Zatem R jest zbiorem istotnym oraz rozdziela trajektorie, co jest sprzeczne z założeniem o R_1.
(3) Oczywiście $\{T \text{ i. o.}\} = \{T \text{ ult.}\}$ p. n.. Gdyby więc $\{T \text{ i. o.}\} \neq \emptyset$ p. n., to istniałaby klasa asymptotycznie zamknięta zawarta w T, co przeczy założeniu o m.
(4) Wynika z (3) oraz z definicji klasy asymptotycznie zamkniętej. □

Łatwo zauważyć, że T z powyższego stwierdzenia jest zbiorem wszystkich stanów chwilowych.

Wydaje się, że odpowiednikiem grafu $g(\mathbf{L})$ może być w przypadku niejednorodnym następujący graf:

$$g_\infty := (S, \{(i,j) : \mathbf{Pr}\{X_t = i, X_{t+1} = j \text{ i. o.}\} > 0\}) .$$

Uzasadnieniem tej definicji jest następujące stwierdzenie.

Stwierdzenie 6.2. *R jest klasą asymptotycznie zamkniętą wtedy i tylko wtedy, gdy R jest klasą zamkniętą w grafie g_∞ zawierającą stan powracający.*

Dowód. Stwierdzenie wynika bezpośrednio ze stwierdzenie 6.1. □

Dla danego $R \subseteq S$ oznaczmy

$$\{R \text{ uni. ult.}\} := \bigcap_{j \in R} \{j \text{ i. o.}\}.$$

Zbiorem powracającym niejednorodnego łańcucha Markowa nazywać będziemy maksymalny w sensie inkluzji podzbiór R przestrzeni stanów S, dla którego

$$\{R \text{ uni. ult.}\} \neq \emptyset \text{ p. n.}$$

Pojęcie zbioru powracającego oddaje następującą intuicję: jest to maksymalny w sensie inkluzji zbiór stanów, które są odwiedzane nieskończenie wiele razy przez wszystkie trajektorie ze zbioru o dodatnim prawdopodobieństwie.

Łatwo zauważyć, że każdy zbiór powracający R jest zawarty w pewnej klasie asymptotycznie zamkniętej R_1 oraz zachodzą inkluzje

$$\{R \text{ uni. ult.}\} \subseteq \{R \text{ ult.}\} \subseteq \{R_1 \text{ ult.}\} \text{ p. n.}$$

Jeżeli dodatkowo $\{R \text{ uni. ult.}\} = \{R_1 \text{ ult.}\}$ p. n., to zbiór powracający nazywać będziemy *klasą powracającą*.

Nie zawsze klasy asymptotycznie zamknięte są zbiorami powracającymi, istnieją również klasy asymptotycznie zamknięte, będące zbiorami powracającymi, które nie są klasami powracającymi. Łatwo można znaleźć odpowiednie kontrprzykłady.

Bezpośrednio z definicji wynika następujące stwierdzenie.

Stwierdzenie 6.3. *$R \subseteq S$ jest klasą powracającą niejednorodnego łańcucha Markowa wtedy i tylko wtedy, gdy R ma następujące własności:*

(1) *istotność;*
(2) *rozdzielanie trajektorii;*
(3) $\{R \text{ i. o.}\} = \{j \text{ i. o.}\}$ p. n. *dla dowolnego $j \in R$.*

W szczególności każda klasa powracająca jest klasą asymptotycznie zamkniętą.

Z twierdzeń zawartych w paragrafie 2.5 monografii Iosifescu [Io] wynika, że jeśli łańcuch Markowa jest jednorodny, to pojęcia klasy zamkniętej, klasy asymptotycznie zamkniętej, zbioru powracającego oraz klasy powracającej są równoważne.

6.2. **Klasy powracające niejednorodnych łańcuchów Markowa z potęgowo znikającymi przejściami.**

Łańcuchami Markowa z *potęgowo znikającymi przejściami* (*PZP*) o wartościach w przestrzeni stanów S, nazywać będziemy niejednorodne łańcuchy Markowa $(X_t)_{t\geq 0}$, spełniające następujący warunek: dla dowolnych $i, j \in S$, $i \neq j$

$$c\varepsilon_t^{d_{ij}} \leq \mathbf{Pr}\{X_{t+1} = j \big| X_t = i\} \leq C\varepsilon_t^{d_{ij}},$$

gdzie $C, c > 0$, $0 < \varepsilon_{t+1} \leq \varepsilon_t < 1$ dla $t \geq 0$, $\lim_{t\to 0} \varepsilon_t = 0$, $0 \leq d_{ij} \leq \infty$, $\varepsilon_t^{\infty} := 0$.

Łatwo zauważyć, że klasa PZP zawiera łańcuchy jednorodne a nawet szerszą od nich klasę (A) Doeblina, sama zaś jest zawarta w klasie (B) Doeblina [Io], [Co 1–2].

Inny interesujący przykład łańcuchów *PZP* pojawia się w optymalizacji. Niech dana będzie *funkcja kosztu* $\mathbf{u}: S \to [0, \infty)$ i związany z nią kombinatoryczny problem minimalizacyjny. Niech ponadto $\mathbf{\Delta} = (\delta_{ij})_{i,j\in S}$ będzie macierzą stochastyczną. *Simulated Annealing* (*SA*) jest to rekurencyjny algorytm "szukający" w następujący sposób stanu $i \in S$, w którym $\mathbf{u}$ przyjmuje globalne minimum:

1) Załóżmy, że w chwili t, aktualnym stanem jest $X_t = i$. Zaczynamy od wylosowania *sąsiada* Y_t stanu i, według danego rozkładu $\delta_{i\cdot}$.

2) Następnie jeśli $Y_t = j$, to rozważamy dwa przypadki: — jeśli $u_j \leq u_i$, to przyjmujemy $X_{t+1} := j$; — w przeciwnym przypadku przyjmujemy $X_{t+1} := j$ z prawdopodobieństwem $\varepsilon_t^{(u_j - u_i)}$ lub $X_{t+1} := i$ z prawdopodobieństwem $1 - \varepsilon_t^{(u_j - u_i)}$.

Dla podkreślenia związków z mechaniką statystyczną, skąd pochodzi idea algorytmu *SA*, ε_t zapisuje się często w postaci $e^{-(1/T_t)}$. Przy tej interpretacji T_t jest temperaturą rozważanego układu fizycznego w chwili t.

Algorytm *SA* tworzy łańcuch Markowa o następujących prawdopodobieństwach przejścia:

$$\mathbf{Pr}\{X_{t+1} = j \big| X_t = i\} = \delta_{ij} \varepsilon_t^{(u_j - u_i) \vee 0} \quad \text{dla } j \neq i.$$

Klasa *PZP* zawiera łańcuchy generowane przez *SA*, jeśli przyjmiemy dla $i \neq j$:

$$d_{ij} := \begin{cases} (u_j - u_i) \vee 0 & \text{jeśli } \delta_{ij} > 0 \\ \infty & \text{w przeciwnym przypadku.} \end{cases}$$

Dla dowolnych $A, B \subseteq S$, $i, j \in S$ oraz $c \geq 0$ wprowadzimy teraz wygodne oznaczenia:

$$(A\big|c) := \{\omega \in \Omega : \sum_{t \geq 0} \varepsilon_t^c \mathbf{1}(X_t(\omega) \in A) = \infty\}$$

$$(A, B\big|c) := \{\omega \in \Omega : \sum_{t \geq 0} \varepsilon_t^c \mathbf{1}(X_t(\omega) \in A, X_{t+1}(\omega) \in B) = \infty\}$$

$$(i\big|c) := (\{i\}\big|c), \quad (i, j\big|c) := (\{i\}, \{j\}\big|c).$$

Zauważmy, że $(A\big|0) = \{A \text{ i. o.}\}$.

Współczynnikiem powracalności α dla stanu i oraz krawędzi (i, j) nazywać będziemy odpowiednio liczby:

$$\alpha_i := \sup\{c \geq 0 : \mathbf{Pr}\{(i\big|c)\} > 0\},$$

$$\alpha_{i,j} := \sup\{c \geq 0 : \mathbf{Pr}\{(i, j\big|c)\} > 0\}, \quad (\sup \emptyset := -\infty).$$

Zauważmy, że stan $i \in S$ łańcucha *PZP* jest *powracający* wtedy i tylko wtedy, gdy $\alpha_i \geq 0$. Ponadto $\alpha_i \leq \rho$, gdzie $\rho := \sup\{c \geq 0 : \sum_{t \geq 0} \varepsilon_t^c = \infty\}$.

Pojęcie współczynnika α różni się istotnie od pojęcia *współczynnika powracalności* β dla stanu i oraz krawędzi (i, j) zdefiniowanego przez Connorsa i Kumara w

pracach odpowiednio [Con], [ConKu 1–2]:

$$\beta_i := \sup\{c \geq 0 : \sum_{t\geq 0} \varepsilon_t^c \mathbf{Pr}(X_t = i) = \infty\},$$
$$\beta_{ij} := \sup\{c \geq 0 : \sum_{t\geq 0} \varepsilon_t^c \mathbf{Pr}(X_t = i, X_{t+1} = j) = \infty\}$$

oraz od pojęcia *współczynnika powracalności na trajektorii* γ dla stanu i oraz krawędzi (i, j) zdefiniowanego odpowiednio przez Borkara w pracy [Bo]:

$$\gamma_i(\omega) := \sup\{c \geq 0 : \sum_{t\geq 0} \varepsilon_t^c \mathbf{1}(X_t(\omega) = i) = \infty\},$$
$$\gamma_{ij}(\omega) := \sup\{c \geq 0 : \sum_{t\geq 0} \varepsilon_t^c \mathbf{1}(X_t(\omega) = i, X_{i+1}(\omega) = j) = \infty\}, \quad \text{gdzie } \omega \in \Omega.$$

W dalszej części tego rozdziału pokażemy, że współczynniki $\boldsymbol{\alpha}$ dają lepszy (od współczynników $\boldsymbol{\beta}$ i $\boldsymbol{\gamma}$) opis asymptotycznych własności trajektorii *LM*. Ponadto można je zawsze efektywnie obliczyć (tzn. kosztem $O(s^3)$).

W dalszej części pracy rozważać będziemy łańcuchy Markowa z potęgowo znikającymi przejściami. Zakładać będziemy, dla wygody, że spełniony jest następujący warunek:

$$\sum_{t\geq 0} \varepsilon_t^\rho = \infty. \tag{6.1}$$

Przypomnijmy, że dla $\emptyset \neq R \subset S$

$$\bar{V}(R) := \min_{\substack{i\in R \\ j\in S\setminus R}} [h(i\big|R) + d_{ij}],$$
$$v(R) := \max_{\emptyset\neq A\subset R} \min_{\substack{i\in A \\ j\in R\setminus A}} [h(i\big|R) + d_{ij}].$$

Niech ponadto dla jednolitości rozważań $\min\emptyset := \infty$, $\bar{V}(S) := \infty$, $v(\{i\}) := -\infty$ dla $i \in S$ oraz $\infty - \infty = \infty$.

Dołkiem w grafie $g^*(\mathbf{D})$ nazywać będziemy minimalny w sensie inkluzji zbiór stanów $R \subset S$ taki, że $\bar{V}(R) \geq \rho$.

Stwierdzenie 6.4. *Niech dany będzie zbiór $R \subseteq S$ oraz funkcja $\mathbf{h}' : R \to \mathbb{R}$. Wtedy równoważne są warunki:*

(1) $\mathbf{h}' \equiv \mathbf{h}(\cdot\big|R)$;

(2) *równania równowagi*

$$\forall_{\emptyset\neq A\subset R} \quad \min_{\substack{i\in A\\ j\in R\setminus A}}(h'_i+d_{ij})=\min_{\substack{i\in A\\ j\in R\setminus A}}(h'_j+d_{ji})$$

oraz $\quad \min_{i\in R} h'_i=0.$

Dowód. "(1) $\Rightarrow$ (2)". Ustalmy $\emptyset\neq A\subset R$. Ze względu na symetrię założeń, wystarczy pokazać, że jeśli dla pewnych $a,j\in A$, $b,i\in R\setminus A$ mamy

$$\begin{cases} h'_a+d_{ab}=\min\limits_{\substack{k\in A\\ l\in R\setminus A}}(h'_k+d_{kl}) \\ h'_i+d_{ij}=\min\limits_{\substack{k\in A\\ l\in R\setminus A}}(h'_l+d_{lk}), \quad \text{to} \\ h'_a+d_{ab}\geq h'_i+d_{ij}. \end{cases} \tag{6.2}$$

Można założyć, że $h'_a+d_{ab}<\infty$. Wtedy istnieje

$$f\in \operatorname*{arg\,min}_{f_0\in F(a|R)} d(f_0\big|R).$$

Zatem istnieje droga z wierzchołka b do a zawarta w f. Niech (t,u) będzie krawędzią tej drogi, przecinającą zbiór A. Wtedy z założenia (1) otrzymujemy

$$h'_a+d_{ab}-d_{tu}=h'(f\cup(a,b)\setminus(t,u))\geq h'_t,$$

ponieważ

$$f\cup(a,b)\setminus(t,u)\in F(t).$$

Stąd i z (6.2) otrzymujemy

$$h'_a+d_{ab}\geq h'_t+d_{tu}\geq h'_i+d_{ij}.$$

Rysunek 6.1.1 przedstawia krawędzie (i,j) oraz (a,b) w grafie $g^*(\mathbf{D})$ z rysunku 2.2.1 spełniające równości (6.2). Rysunek 6.1.2 przedstawia najkrótsze drzewo o korzeniu u w grafie $g^*(\mathbf{D})$.

"(1) $\Leftarrow$ (2)". Z udowodnionej części wynika, że wektor $\mathbf{h}$ spełnia równania równowagi. Załóżmy dla sprzeczności, że $\mathbf{h}'\not\equiv\mathbf{h}$. Z drugiej równości (2) wynika, że przynajmniej jeden ze zbiorów

$$A:=\{i\in R:\ h_i>h'_i\} \quad \text{lub} \quad A':=\{i\in R:\ h_i<h'_i\}$$

jest właściwym podzbiorem R. Ze względu na symetrię założeń można założyć, że jest to A. Wtedy

$$\min_{\substack{i\in A\\ j\in R\setminus A}}(h'_i+d_{ij})<\min_{\substack{i\in A\\ j\in R\setminus A}}(h_i+d_{ij})$$

$$= \min_{\substack{i\in A\\ j\in R\setminus A}} (h_j + d_{ji}) \le \min_{\substack{i\in A\\ j\in R\setminus A}} (h'_j + d_{ji})$$
$$= \min_{\substack{i\in A\\ j\in R\setminus A}} (h'_i + d_{ij}),$$

co jest sprzeczne z założeniem o $\mathbf{h}'$. □

Łatwo udowodnić następujące stwierdzenia.

Stwierdzenie 6.5.

(1) *Każdy graf* $g^*(\mathbf{D})$ *ma przynajmniej jeden dołek.*
(2) *Dwa różne dołki w grafie* $g^*(\mathbf{D})$ *są wzajemnie rozłączne.*

Stwierdzenie 6.6. *Niech dany będzie zbiór* $R \subseteq S$*. Wtedy następujące warunki są równoważne.*

(1) R *jest dołkiem.*
(2) $v(R) < \rho \le \bar{V}(R)$.

Obliczanie $h(i\big|R)$, "wysokości" stanów w zbiorze R, oraz znajdowanie dołków bezpośrednio z definicji może być nieefektywne (por. z uwagą 3.1 (1)). Okazuje się, że niewielka modyfikacja algorytmu 4.3 lub 4.4 pozwala liczyć $h(i\big|R)$ oraz znajdować dołki kosztem $O(s^3)$. Wynika to z faktu, że każdy dołek jest elementem pewnego zbioru S^k, gdzie $k \le K$ oraz następującego stwierdzenia.

Stwierdzenie 6.7. *Załóżmy, że* $I^k \in S^k$ *dla* $k \le K$*. Wtedy*

$$\bar{V}(I^k) = \min_{J^k \neq I^k} \bar{d}^k(I^k, J^k)$$

Dowód . Udowodnimy najpierw, że jeżeli $I^k, J^k \in S^k$, $I^k \neq J^k$ oraz $k \le K$, to

$$\bar{d}^k(I^k, J^k) = \min_{\substack{i\in I^k\\ j\in J^k}} [h(i\big|I^k) + d_{ij}]. \tag{6.3}$$

Dla $k = 1$ otrzymujemy

$$\bar{d}^1(I^1, J^1) = v(I^1) + \min_{\substack{I^0\subseteq I^1\\ J^0\subseteq J^1}} [\bar{d}^0(I^0, J^0) - \bar{V}(I^0)]$$

$$= \min_{\substack{i\in I^1\\ j\in J^1}} [h(i\big|I^1) + d_{ij}].$$

Załóżmy teraz, że wzór (6.3) jest prawdziwy dla $k = m-1$. Wtedy z lematu 4.2 otrzymujemy:

$$\begin{aligned}\bar{d}^m(I^m, J^m) &= v(I^m) + \min_{\substack{I^{m-1}\subseteq I^m\\ J^{m-1}\subseteq J^m}} [\bar{d}_{m-1}(I^{m-1}, J^{m-1}) - \bar{V}(I^{m-1})] \\ &= \min_{\substack{I^{m-1}\subseteq I^m\\ J^{m-1}\subseteq J^m}} \left\{ \min_{\substack{i\in I^{m-1}\\ j\in J^{m-1}}} \left[\left(h(i\big|I^{m-1}) + d_{ij}\right) + h(I^{m-1}\big|I^m)\right] \right\} \\ &= \min_{\substack{i\in I^m\\ j\in J^m}} [h(i\big|I^m) + d_{ij}].\end{aligned}$$

Ze wzoru (6.3) otrzymujemy teraz

$$\begin{aligned}\bar{V}(I^k) &= \min_{\substack{i\in I^k\\ j\notin I^k}} [h(i, I^k) + d_{ij}] = \min_{J^k\neq I^k} \min_{\substack{i\in I^k\\ j\in J^k}} [h(i, I^k) + d_{ij}] \\ &= \min_{J^k\neq I^k} \bar{d}^k(I^k, J^k),\end{aligned}$$

ponieważ $\bigcup_{J^k\neq I^k} = S \setminus I^k$. □

Głównym rezultatem tego rozdziału jest następujące twierdzenie.

Twierdzenie 6.1.

(1) *Dla dowolnego zbioru $R \subseteq S$, R jest klasą powracającą wtedy i tylko wtedy, gdy R jest dołkiem.*

(2) *Dla dowolnego stanu $i \in S$, jeśli i należy do pewnego dołka R, to $\alpha_i = \rho - h(i\big|R)$; w przeciwnym przypadku $\alpha_i = -\infty$.*

Dowód twierdzenia 6.1 poprzedzimy kilkoma lematami.

Lemat 6.1. *Niech Y_t, Z_t, dla $t = 1, 2, \ldots$, będą zmiennymi losowymi określonymi na przestrzeni probabilistycznej $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{Pr})$. Załóżmy, że*

(i) $Y_t \geq 0$ p. n., $t = 1, 2, \ldots$;

(ii) *istnieje $M > 0$ takie, że dla $t = 1, 2, \ldots$, $|Y_t - Z_t| < M$ p. n.;*

(iii) *ciąg $S_t = \sum_{k=1}^{t}(Y_k - Z_k)$ jest podmartyngałem względem ciągu $\sigma(S_1, \ldots, S_t)$, $t = 1, 2, \ldots$.*

Wtedy

$$\left\{\sum_{t>0} Z_t = \infty\right\} \subseteq \left\{\sum_{t>0} Y_t = \infty\right\} \quad \text{p. n.}$$

Dowód. Z twierdzenia 1 [Shi, str. 550] wynika, że

$$\left\{\sup_t S_t < \infty\right\} = \left\{\text{istnieje skończona granica } \lim_t S_t\right\} \subseteq \left\{\inf_t S_t > -\infty\right\} \quad \text{p. n.}$$

Stąd i z założenia otrzymujemy:

$$\left\{\sum_{t>0} Z_t = \infty, \sum_{t>0} Y_t < \infty\right\}$$
$$\subseteq \left\{\inf_t S_t = -\infty\right\} \subseteq \left\{\sup_t S_t = \infty\right\} \subseteq \left\{\sum_{t>0} Y_t = \infty\right\} \quad \text{p. n.}$$

W rezultacie

$$\left\{\sum_{t>0} Z_t = \infty\right\} = \left\{\sum_{t>0} Z_t = \infty, \sum_{t>0} Y_t < \infty\right\} \cup \left\{\sum_{t>0} Z_t = \infty, \sum_{t>0} Y_t = \infty\right\}$$
$$\subseteq \left\{\sum_{t>0} Y_t = \infty\right\} \quad \text{p. n.}$$

□

Lemat 6.2. *Dla dowolnego $d \geq 0$ oraz $i, j \in S$,*

$$(i\big|d + d_{ij}) = (i, j\big|d) \text{ p. n.;} \tag{1}$$

$$\alpha_{ij} = \begin{cases} \alpha_i - d_{ij} & \text{jeśli } \alpha_i \geq d_{ij} \\ -\infty & \text{jeśli } \alpha_i < d_{ij}. \end{cases} \tag{2}$$

Dowód. (1) Udowodnimy najpierw inkluzję "$\subseteq$". Z uwagi na lemat 6.1 wystarczy pokazać, że

$$\sum_{k=0}^{t} \left[\varepsilon_k^d \mathbf{1}(X_k = i, X_{k+1} = j) - c\varepsilon_k^{d+d_{ij}} \mathbf{1}(X_k = i)\right]$$

jest podmartyngałem względem $\sigma(X_0, \ldots, X_t)$, czyli że

$$\mathbf{E}\left[\varepsilon_t^d \mathbf{1}(X_t = i, X_{t+1} = j) - c\varepsilon_t^{d+d_{ij}} \mathbf{1}(X_t = i)\big|X_0, \ldots, X_t\right] \geq 0 \text{ p. n. dla } t \geq 0.$$

Ponieważ $(X_t)_{t\geq 0}$ jest łańcuchem Markowa, zatem wystarczy pokazać, że

$$\mathbf{Pr}\{X_{t+1}=j\big|X_t\}\mathbf{1}(X_t=i)\geq c\varepsilon_t^{d_{ij}}\mathbf{1}(X_t=i)\ \text{ p. n. dla } t\geq 0.$$

Na zbiorze $\{X_t\neq i\}$ powyższa nierówność jest oczywista, natomiast na zbiorze $\{X_t=i\}$ jest spełniona z definicji łańcucha *PZP*.

Dla dowodu "$\supseteq$" pokazujemy w podobny sposób, że

$$\sum_{k=0}^{t}\Big[C\varepsilon_k^{d+d_{ij}}\mathbf{1}(X_k=i)-\varepsilon_k^d\mathbf{1}(X_k=i,X_{k+1}=j)\Big]$$

jest podmartyngałem względem $\sigma(X_0,\ldots,X_t)$.

(2) Jeśli $\alpha_i\geq d_{ij}$, to (2) wynika z (1) po podstawieniu $d:=\alpha_i-d_{ij}$. Dla dowodu równości w przypadku, gdy $\alpha_i<d_{ij}$ przypuśćmy, że $\alpha_{ij}\geq 0$. Wtedy istniałoby $d\geq 0$ takie, że $\mathbf{Pr}\{(i,j\big|d)\}>0$. Stąd i z (1) otrzymalibyśmy $\mathbf{Pr}\{(i\big|d_{ij})\}\geq \mathbf{Pr}\{(i\big|d+d_{ij})\}>0$, co jest sprzeczne z założeniem, że $\alpha_i<d_{ij}$. □

Zauważmy tutaj, że równość (2) z lematu 6.2 dla współczynników β byłaby natychmiastową konsekwencją równań Chapmana–Kołmogorowa.

Lemat 6.3.

(1) *Dla dowolnych* $\emptyset\neq A\subset S$ *oraz* $d\geq 0$

$$\bigcup_{i\in A,\,j\notin A}(i,j\big|d)=\bigcup_{i\in A,\,j\notin A}(j,i\big|d)\ \text{ p. n.}$$

(2) *(Równania równowagi dla współczynników powracalności)*
Dla dowolnego $\emptyset\neq A\subset S$

$$\max_{i\in A,\,j\notin A}\alpha_{ij}=\max_{i\in A,\,j\notin A}\alpha_{ji}.$$

Dowód. Niech $\sigma_1:=\min\{k\geq 0:\ X_k\in A\}$, $\tau_t:=\min\{k>\sigma_t:\ X_k\notin A\}$, $\sigma_{t+1}:=\min\{k>\tau_t:\ X_k\in A\}$, $t\geq 1$. Oczywiście $\sigma_t<\tau_t<\sigma_{t+1}$. Ponadto z monotoniczności ciągu $(\varepsilon_t)_{t\geq 0}$ wynika, że dla każdego $d\geq 0$:

$$\bigcup_{i\in A,\,j\notin A}\left\{\sum_{t\geq 0}\varepsilon_t^d\mathbf{1}(X_t=i,X_{t+1}=j)=\infty\right\}$$
$$=\left\{\sum_{i\in A,\,j\notin A}\sum_{t\geq 0}\varepsilon_t^d\mathbf{1}(X_t=i,X_{t+1}=j)=\infty\right\}$$

$$= \left\{ \sum_{t\geq 0} \varepsilon_t^d \mathbf{1}(X_t \notin A, X_{t+1} \in A) = \infty \right\} = \left\{ \sum_{t\geq 0} \varepsilon_{\sigma_t}^d = \infty \right\} \subseteq \left\{ \sum_{t\geq 0} \varepsilon_{\tau_t}^d = \infty \right\}$$

$$= \left\{ \sum_{t\geq 0} \varepsilon_t^d \mathbf{1}(X_t \in A, X_{t+1} \notin A) = \infty \right\}$$

$$= \left\{ \sum_{i\in A,\, j\notin A} \sum_{t\geq 0} \varepsilon_t^d \mathbf{1}(X_t = j, X_{t+1} = i) = \infty \right\}$$

$$= \bigcup_{i\in A,\, j\notin A} \left\{ \sum_{t\geq 0} \varepsilon_t^d \mathbf{1}(X_t = j, X_{t+1} = i) = \infty \right\} \text{ p. n.}$$

Podobnie dowodzimy inkluzji przeciwnej, co łącznie daje (1).

Łatwo teraz zauważyć, że dla każdego $d \geq 0$, istnieją takie stany $i \in A$, $j \in S \setminus A$, że $(i, j\big|d) \neq \emptyset$ p. n. wtedy i tylko, gdy istnieją takie stany $k \in A$, $l \in S \setminus A$, że $(l, k\big|d) \neq \emptyset$ p. n. Stąd wynika (2). □

Lemat 6.4. *Niech R będzie klasą asymptotycznie zamkniętą. Wtedy:*

(1) *istnieje $p \geq 1$ oraz istnieją $i_1, \ldots, i_p \in R$ takie, że*

$$\alpha_{i_1} = \ldots = \alpha_{i_p} = \rho \quad \textit{oraz} \quad (R\big|0) = (i_1\big|\rho) \cup \ldots \cup (i_p\big|\rho) \text{ p. n.};$$

(2) $\max_{i\in R,\, j\notin R}(\alpha_i - d_{ij}) < 0$;

(3) *dla każdego $\emptyset \neq A \subset R$,*

$$\alpha(A) := \max_{i\in A,\, j\in R\setminus A} (\alpha_i - d_{ij}) \geq 0;$$

(4) *dla każdego $\emptyset \neq A \subset R$,*

$$\alpha(A) = \max_{i\in A,\, j\in R\setminus A} (\alpha_j - d_{ji}).$$

Dowód. Część (1) jest konsekwencją założenia (6.1), definicji klasy asymptotycznie zamkniętej, współczynników powracalności oraz równości

$$\Omega = (\Omega\big|\rho) = \bigcup_{i\in S} (i\big|\rho) \text{ p. n. } .$$

Części (2) i (3) wynikają z definicji, stwierdzenia 6.2 oraz lematu 6.2. Część (4) wynika z definicji oraz lematów 6.2 i 6.3. □

Lemat 6.5. *Niech R będzie klasą asymptotycznie zamkniętą. Wtedy dla dowolnego $i \in R$,*

$$\{R \text{ i. o.}\} = (i|\alpha_i) \text{ p. n. } .$$

W szczególności R jest klasą powracającą.

Dowód. Z lematu 6.4 (1) wynika, że w rodzinie $\{(i|\alpha_i) : i \in R \text{ oraz } (i|\alpha_i) \neq \emptyset \text{ p. n.}\}$ istnieje zbiór $(i_0|\alpha_{i_0})$ minimalny w sensie "$\subseteq$ p. n.". Niech ponadto

$$A := \{i \in R : (i|\alpha_i) = (i_0|\alpha_{i_0}) \text{ p. n.}\}.$$

Pokażemy najpierw, że $A = R$. Przypuśćmy, że $A \subset R$. Z lematu 6.4 (3) wynika, że $\alpha(A) \geq 0$. Zatem założenia lematów 6.2 i 6.3 są spełnione dla $d = \alpha(A)$ i otrzymujemy równości

$$\begin{aligned}(i_0|\alpha_{i_0}) = \bigcup_{\substack{i\in A \\ \max_{j\notin A} \alpha_{ij}=\alpha(A)}} (i|\alpha_i) &= \bigcup_{\substack{i\in A \\ j\notin A}} (i,j|\alpha(A)) \\ = \bigcup_{\substack{i\in A \\ j\notin A}} (j,i|\alpha(A)) &= \bigcup_{\substack{j\notin A \\ \max_{i\in A} \alpha_{ij}=\alpha(A)}} (j|\alpha_j) \text{ p. n.}\end{aligned}$$

Ponieważ R rozdziela trajektorie, więc istnieje $j \in R \setminus A$ taki, że $\emptyset \neq (j|\alpha_j) \subseteq (i_0|\alpha_{i_0})$ p. n.. Jeśli teraz $(j|\alpha_j) \subset (i_0|\alpha_{i_0})$ p. n., to mamy sprzeczność z minimalnością $(i_0|\alpha_{i_0})$. Jeśli natomiast $(j|\alpha_j) = (i_0|\alpha_{i_0})$ p. n. — mamy sprzeczność z definicją A. W rezultacie dla dowolnego $i \in R$

$$(i|\alpha_i) = (i_0|\alpha_{i_0}) \text{ p. n.}$$

Z lematu 6.4 (1) wynika teza. □

Dowód twierdzenia 6.1. (1) "⇒". Łatwo zauważyć, że dla dowolnych $A, B \subseteq S$ warunek

$$\max_{i\in A,\, j\in B} (\alpha_i - d_{ij}) \geq 0$$

jest równoważny warunkowi

$$\min_{i\in A,\, j\in B} (\rho - \alpha_i - d_{ij}) \geq \rho.$$

Zatem z lematu 6.4 (2)–(4) wynika, że współczynniki $h'_i := \rho - \alpha_i$ spełniają równania równowagi w stwierdzeniu 6.4 dla $\mathbf{D}(S \setminus R \big| S \setminus R) = (d_{ij})_{i,j \in R}$. Stąd $h'_i = h(i\big|R)$. W rezultacie ze stwierdzenia 6.6 wynika teza. □

Lemat 6.6. *Jeśli $A \subseteq S$ jest dołkiem, to* $\mathbf{Pr}\{X_t \in A, t \geq 0\} > 0$.

Dowód. Rozważmy proces X'_t, który powstaje przez ograniczenie X_t do

$$S' := A \cup \{i \notin A : \ \exists j \in A \text{ taki, że } d_{ij} < \infty\}.$$

Niech dla dowolnych $i, j \in S'$,

$$\mathbf{Pr}\{X'_{t+1} = j \big| X'_t = i\} := \begin{cases} \mathbf{Pr}\{X_{t+1} = j \big| X_t = i\} & \text{jeśli } i \in A \\ 1/|A| & \text{jeśli } i \in S' \setminus A, \ j \in A \\ 0 & \text{w przeciwnym przypadku.} \end{cases}$$

Niech ponadto dla każdego $i \in S'$, $\mathbf{Pr}\{X'_0 = i\} := \mathbf{Pr}\{X_0 = i\}/c$, gdzie $c := \sum_{j \in S} \mathbf{Pr}\{X_0 = j\} > 0$.

Ponieważ fakt, że A jest dołkiem dla $(X_t)_{t \geq 0}$, zależy tylko od ρ oraz d_{ij} takich, że $i \in A$, $j \in S'$, więc A jest również dołkiem dla $(X'_t)_{t \geq 0}$. Z równości

$$\Omega = \bigcup_{i \in S'} \left\{ \sum_{t \geq 0} \varepsilon_t^\rho \mathbf{1}(X'_t = i) = \infty \right\} \text{ p. n.}$$

wynika, że istnieje $i \in S'$ takie, że $\alpha'_i = \rho$. Jeżeli $i \in S' \setminus A$, to z lematów 6.2 (2) i 6.3 (2) wynika, że dla dowolnego $j \in A$, $\alpha'_i = \alpha'_j - d_{ji} \leq \alpha'_j$. Zatem istnieje $a \in A$ takie, że $\alpha_a = \rho$. W konsekwencji istnieje klasa asymptotycznie zamknięta R zawierająca a. Z udowodnionej części twierdzenia wynika, że R jest dołkiem. Stąd oraz z tego, że dołki są wzajemnie rozłączne (stwierdzenie 6.5 (2))wnioskujemy, że A jest klasą asymptotycznie zamkniętą dla $(X'_t)_{t \geq 0}$.

Ponieważ dla każdego $k \geq 0$, $c\mathbf{Pr}\{X_t \in A, \ k \geq t \geq 0\} = \mathbf{Pr}\{X'_t \in A, \ k \geq t \geq 0\}$, więc z ciągłości prawdopodobieństwa: $c\mathbf{Pr}\{X_t \in A, \ t \geq 0\} = \mathbf{Pr}\{X'_t \in A, \ t \geq 0\}$.

Przypuśćmy teraz, że dla każdego $k \geq 0$,

$$\begin{aligned} 0 = c\mathbf{Pr}\{X_t \in A, \ t \geq 0\} &= \mathbf{Pr}\{X'_t \in A, \ t \geq 0\} \\ &= \mathbf{Pr}\{X'_t \in A, \ t \geq k \big| X'_t \in A, \ k \geq t \geq 0\} \mathbf{Pr}\{X'_t \in A, \ k \geq t \geq 0\}. \end{aligned}$$

Wtedy dla każdego $k \geq 0$, $\mathbf{Pr}\{X'_t \in A,\ t \geq k \big| X'_k \in A\} = 0$ oraz oczywiście $\mathbf{Pr}\{X'_t \in A,\ t \geq k \big| X'_k \notin A\} = 0$. W rezultacie dla każdego $k \geq 0$, $\mathbf{Pr}\{X'_t \in A,\ t \geq k\} = 0$, więc z ciągłości prawdopodobieństwa $\mathbf{Pr}\{X'_t \in A \text{ ult.}\} = 0$, co jest sprzeczne z tym, że A jest klasą asymptotycznie zamkniętą dla $(X'_t)_{t\geq 0}$. □

Dowód twierdzenia 6.1. (1) "⇐" Niech $R_1, \ldots, R_m$ będą wszystkimi klasami asymptotycznie zamkniętymi danego łańcucha Markowa *PZP*. Ze stwierdzenia 6.1 oraz lematu 6.6 wynika, że istnieje $1 \leq j \leq m$ takie, że

$$\{X_t \in R,\ t \geq 0\} \cap \{R_j \text{ ult.}\} \neq \emptyset \text{ p. n.}$$

Stąd $R_j \cap R \neq \emptyset$.

Z udowodnionej części (1) "⇒" otrzymujemy, że R_j jest dołkiem. Zatem ze stwierdzenie 6.5 (2) wynika, że R jest klasą asymptotycznie zamkniętą. Stąd i z lematu 6.5 otrzymujemy tezę.

(2) Jeśli stan $i \in S$ należy do pewnego dołka R, to z udowodnionej części (1) "⇐" wynika, że i należy do klasy powracającej R, więc z dowodu części (1) "⇒" wynika teza. W przeciwnym przypadku stan i jest stanem chwilowym, więc $\alpha_i = -\infty$. □

Ilustracją różnicy pomiędzy współczynnikami α i β może być następujący przykład, rozważany przez Connorsa i Kumara w pracach [Con] i [ConKu 1–2].

Przykład 6.2. Niech $(X_t)_{t\geq 0}$ będzie łańcuchem Markowa generowanym przez *SA* o przestrzeni stanów $S := \{1, 2, 3\}$ oraz funkcji kosztu $u_i := i$. Niech ponadto $\delta_{13} = \delta_{23} = 1$, $\delta_{32} = a = 1 - \delta_{31}$, gdzie $a \in (0, 1)$ oraz $\delta_{ij} = 0$ w pozostałych przypadkach.

Connors i Kumar obliczyli za pomocą algorytmu o wykładniczej złożoności obliczeniowej, wszystkie rozwiązania równań równowagi dla β, co daje w rezultacie: $\beta_1 = 1$, $\beta_2 \in \{-\infty\} \cup [0, 1)$, $\beta_3 = -\infty$. Łatwo zauważyć, że $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = \alpha_3 = -\infty$. Metoda Connorsa i Kumara nie pozwala zatem, w odróżnieniu od naszej, na jednoznaczne i efektywne obliczenie współczynników powracalności.

Connors w swojej pracy doktorskiej [Con] za pomocą bezpośrednich lecz pracochłonnych obliczeń udowodnił, że $\beta_2 = a$. Wskazuje to na nieadekwatność współczynników β: stan odwiedzany prawie na pewno skończenie wiele razy ma

współczynnik powracalności β większy od 0. W Dodatku zamieszczamy odpowiedni rysunek.

Uwagi 6.1.

(1) Klasy Doeblina są omawiane w pracach Cohna [Co 1–2] oraz monografii Iosifescu [Io].

(2) Pewne warianty łańcuchów Markowa z potęgo znikającymi przejściami rozważane były wcześniej w pracach [Ts 1–2], [ChiCho 2–3], [HwSh 1–2], [Con], [ConKu 1–2], [DeKuKu], [NiPo], [Po].

(3) Literatura dotycząca *SA* liczy kilkaset pozycji, w tym kilka monografii. Reprezentatywny jej wybór znaleźć można w pracy Romea i Sangiovanniego–Vincentellego [RomSa]. Główne kierunki badań i zastosowań związanych z algorytmem Simulated Annealing są następujące.
   — Własności asymptotyczne niejednorodnego łańcucha Markowa generowanego przez *SA* — w tym osiągalność globalnego minimum z prawdopodobieństwem 1 i zachowanie $\Pr\{X_t = i\}$ przy $t \to \infty$ (patrz np. [Bo], [Ca], [ChiCho 1–3], [Con], [ConKu 1–2], [DeKuKu], [Ge], [GeGe], [Ha], [HwSh 1–2], [NiPo], [Ts 1–2]).
   — Komputerowa symulacja procesu mającego na celu wprowadzenie danego układu fizycznego o wielu stopniach swobody do stanu o najmniejszej energii przez gwałtowne podgrzanie, a następnie powolne studzenie (stąd właśnie pochodzi nazwa "Simulated Annealing"). Proces annealingu jest wykorzystywany do tworzenia kryształów.
   — *SA* jako metoda relaksacji i rekonstrukcji obrazu. Przełomem stała się w tej dziedzinie praca Gemanów [GeGe].
   — *SA* w optymalizacji kombinatorycznej. Ten kierunek jest najliczniej reprezentowany w literaturze (patrz np. [LaAa], [JeSo], [So], [KiGeVe]). Dalszą klasyfikację badań w tym zakresie można przeprowadzać ze względu na rodzaj problemu (np. problem komiwojażera, problem podziału grafu, projektowanie elementów *VLSI* i inne) oraz model obliczalności używany w algorytmie — sekwencyjny albo równoległy (w tym "sieci neuronowe" i "Maszyny Boltzmanna").

(4) Jeśli założenie (6.1) nie jest spełnione, to dla dowodu twierdzenia w tym przypadku należy zmienić definicję dołka przez zastąpienie warunku $\bar{V}(R) > \rho$ na warunek $\bar{V}(R) \geq \rho$. Ponadto w lemacie 6.4 (1)–(2) należy podstawić

$$\rho := (\rho - \min\{d_{ij} : \ 0 < d_{ij} < \infty\}) \vee 0.$$

Reszta rozumowania pozostaje bez zmian.

(5) Łatwo zauważyć, że wszystkie podane tutaj fakty pozostają prawdziwe, jeśli monotoniczność ciągu $(\varepsilon_t)_t$ zastąpić warunkiem:

$$\exists M < \infty \ \forall \ m, n \text{ jeśli } n \geq m \geq 1, \text{ to } \varepsilon_n \leq M\varepsilon_m.$$

6.3. **Osiągalność globalnego minimum z prawdopodobieństwem 1 przez algorytm Simulated Annealing.**

Podane w poprzedniej części twierdzenie prowadzi do konstruktywnego kryterium osiągalności z prawdopodobieństwem 1 dowolnego podzbioru A przestrzeni stanów S przez łańcuchy Markowa z regularnie znikającymi przejściami.

Wniosek 6.1. *Dla łańcucha Markowa z klasy PZP oraz dowolnego $A \subseteq S$, następujące warunki są równoważne:*

(1) $\mathbf{Pr}\{A \text{ i. o.}\} = 1$.

(2) $\mathbf{Pr}\{\exists_{t\geq 0} X_t \in A\} = 1$.

(3) *Każdy dołek zawiera punkt należący do A.*

Dowód. Implikacja (1)⇒(2) jest oczywista, (2)⇒(3) wynika bezpośrednio przez transpozycję z lematu 6.6, natomiast (3)⇒(1) wynika bezpośrednio z twierdzenia 6.1. □

W dalszej części będziemy rozważać łańcuchy Markowa generowane przez *SA*. Pokażemy, że wniosek 6.1 jest uogólnieniem twierdzenia udowodnionego przez Connorsa i Kumara w pracach [Con] i [ConKu 1–2]. Wcześniej jednak podamy kilka definicji.

Przyjmijmy dla $h \leq 0$

$$g(\mathbf{\Delta}, \mathbf{u}, h) := (s, \{(i, j) : \ \delta_{ij} > 0 \text{ oraz } u_i \vee u_j \leq h\}).$$

Będziemy mówić że stan j jest *osiągalny na wysokości* h ze stanu i (oznaczenie $i[h] \to j$), jeśli $i \to j$ w grafie $g(\mathbf{\Delta}, \mathbf{u}, h)$.

Zakładać będziemy, że macierz $\mathbf{\Delta}$ jest nieprzywiedlna oraz, że łańcuch generowany przez SA jest *słabo odwracalny (weak reversible)*, to znaczy, że dla każdego $h \geq 0$ relacja $[h] \to$ jest symetryczna. Oczywiście $[h] \to$ jest przechodnia.

Niech $S^* := \{i \in S : \ \forall_{j \in S}\ u_i \leq u_j\}$ będzie zbiorem globalnych minimów oraz

$$d^* := \min\{d \geq 0 : \ \forall_{i \in S}\ \exists_{j \in S^*} \quad i[u_i + d] \to j\}.$$

Łatwo zauważyć, że relacja $[h] \to$ jest symetryczna wtedy i tylko wtedy, gdy w grafie $g(\mathbf{\Delta}, \mathbf{u}, h)$ nie ma stanów nieistotnych.

Kolejny lemat jest odpowiednikiem twierdzenia 5 o potencjale z pracy [ConKu 2].

Lemat 6.7. *Jeśli R jest dołkiem, to dla wszystkich $i \in R$*

$$h(i\big|R) = u_i - \min_{j \in R} u_j.$$

Dowód. Ponieważ $\min_{j \in R} h(j\big|R) = 0$, więc wystarczy pokazać, że dla dowolnego $i \in R$, $u_i - h(i\big|R) = \text{const}$. Niech $A := \arg\min_{a \in R} \big(u_a - h(a\big|R)\big)$. Pokażemy, że $A = R$. Przypuśćmy, że $A \subset R$. Niech $i, l \in A$, $j, k \in R \setminus A$ oraz

$$(i, j) \in \arg\min_{\substack{a \in A \\ b \in R \setminus A}} (h(a\big|R) + d_{ab}),$$

$$(k, l) \in \arg\min_{\substack{a \in A \\ b \in R \setminus A}} (h(b\big|R) + d_{ba}).$$

Ponieważ $i[u_j \vee u_i] \to j$, więc ze słabej odwracalności wynika, że

$$u_l \vee u_k \leq u_j \vee u_i.$$

Stąd po odjęciu stronami $(u_i + u_k)$ otrzymujemy

$$(u_l - u_k) \vee 0 - u_i \leq (u_j - u_i) \vee 0 - u_k,$$

czyli

$$(u_l - u_k) \vee 0 + u_k \leq (u_j - u_i) \vee 0 + u_i. \tag{6.4}$$

Ponadto z równań równowagi dla $h(\cdot\big|R)$ wynika, że

$$-h(k\big|R) - (u_l - u_k) \vee 0 = -h(i\big|R) - (u_j - u_i) \vee 0. \tag{6.5}$$

W rezultacie po dodaniu (6.4) i (6.5) otrzymujemy

$$u_k - h(k|R) \leq u_i - h(i|R),$$

co jest sprzeczne z definicją A. □

Wniosek 6.2. *Dla łańcucha Markowa nieprzywiedlnego i słabo odwracalnego, generowanego przez algorytm Simulated Annealing następujące warunki są równoważne:*

(1) $\mathbf{Pr}\{S^* \text{ i. o.}\} = 1$.
(2) $\mathbf{Pr}\{\exists_{t\geq 0} X_t \in S^*\} = 1$.
(3) $\sum_{t\geq 0} \varepsilon_t^{d^*} = \infty$.

Dowód. Wystarczy udowodnić równoważność warunku (3) i warunku (3) z wniosku 6.1. Zauważmy, że warunek (3) jest równoważny nierówności $d^* \leq \rho$. Nierówność ta z kolei jest równoważna warunkowi

$$\forall_{i\in S\setminus S^*}\ \exists_{j\in S^*}\ i[u_i + \rho] \to j. \tag{6.6}$$

Ze stwierdzenia 6.6 (2) oraz lematu 6.7 wynika, że zbiór stanów $R \subseteq S$ jest dołkiem wtedy i tylko wtedy, gdy

$$\min_{\substack{i\in R,\, j\in S\setminus R\\ \delta_{ij}>0}} [u_i + (u_j - u_i) \vee 0] = \min_{\substack{i\in R,\, j\in S\setminus R\\ \delta_{ij}>0}} [u_j \vee u_i] \geq \rho + \min_{k\in R} u_k \tag{6.7}$$

oraz

$$\forall_{\emptyset\neq A\subset R} \min_{\substack{i\in A,\, j\in R\setminus A\\ \delta_{ij}>0}} [u_j \vee u_i] < \rho + \min_{k\in R} u_k. \tag{6.8}$$

Stąd wynika, że $R \subseteq S$ jest dołkiem wtedy i tylko wtedy, gdy spełnione są warunki

$$\forall_{i,j\in R}\ i[\min_{k\in R} u_k + \rho] \to j \tag{6.9}$$

oraz

$$\forall_{i\in R,\, j\notin R} \quad \text{nieprawda, że} \quad i[\min_{k\in R} u_k + \rho] \to j. \tag{6.10}$$

Przypuśćmy teraz, że warunek (6.6) nie jest spełniony, czyli

$$A := \{i_0 \in S \setminus S^* :\ \forall_{j\in S^*} \quad \text{nieprawda, że} \quad i[u_i + \rho] \to j\} \neq \emptyset.$$

Niech

$$i_0 \in \arg\min_{j \in A} u_j.$$

Łatwo zauważyć, że zbiór

$$\{i \in S : \ i_0[u_{i_0} + \rho] \to j\}$$

spełnia warunki (6.9) i (6.10) oraz jest rozłączny z S^*.

Odwrotnie: jeżeli istnieje dołek R rozłączny z S^*, to z warunku (6.10) wynika, że

$$\forall_{i \in \arg\min_{k \in R} u_k} \ \forall_{j \in S^*} \quad \text{nieprawda, że} \quad i[u_i + \rho] \to j.$$

□

Uwagi 6.2.

(1) Na rysunkach 6.2.1–6.2.5 przedstawiony jest przykład grafu indukowanego przez słabo odwracalny *ŁM* generowany przez algorytm *SA*. Rysunki te ilustrują wpływ "wykładnika rozbieżności" ρ na klasyfikację stanów. Stany powracające są zaczernione.

(2) Rozważany tutaj problem osiągalności globalnego minimum z prawdopodobieństwem 1 przez *SA* rozwiązali częściowo Connors i Kumar w pracach [Con] i [ConKu 1–2]. Udowodnili oni, że przy założeniach nieprzywiedlności i słabej odwracalności następujące warunki są równoważne:
   (a) *SA* osiąga globalne minimum z prawdopodobieństwem 1.
   (b) *SA* jest zbieżny według prawdopodobieństwa do globalnego minimum.
   (c) $\sum_{t \geq 0} \varepsilon_t^d = \infty$, gdzie d jest, odpowiednio zdefiniowaną, głębokością najmniejszego lokalnego minimum, które nie jest globalnym minimum.

   Zieliński w pracy [Zie] przy pomocy lematu Borela–Cantelli'ego dla martyngałów podał warunek dostateczny na to, aby Simulated Annealing określony na dowolnej przestrzeni stanów S nie opuścił z prawdopodobieństwem 1 obszaru przyciągania lokalnego minimum. Niemiro w pracy [Ni 1] opisał klasy powracające dla *SA* przy założeniu prostej, jednowymiarowej struktury sąsiedztw. Podstawowym narzędziem jest tam lemat 1 uogólniający lemat Borela–Cantelli'ego dla martyngałów. Borkar w pracy [Bo], używając podobnego faktu, udowodnił "równania równowagi" dla γ.

Rezultaty Connorsa i Kumara, jak również zastosowana tam metoda rozwiązywania "równań równowagi" dla β były punktem wyjścia dla mojej pracy magisterskiej [Po] oraz wspólnej pracy z W. Niemiro [NiPo], gdzie scharakteryzowaliśmy σ-ciało ogonowe łańcuchów *PZP* za pomocą współczynników powracalności γ. Nie znając rozwinięć w lasy skierowane, współczynniki γ i dołki opisaliśmy za pomocą rozwiązań równań równowagi ze stwierdzenia 6.4 (2). Udowodniliśmy ponadto, że rozwiązania równań równowagi są określone jednoznacznie z dokładnością do przesunięcia oraz wprowadziliśmy algorytm, który je oblicza. Niemiro w pracy [Ni 2] wykorzystał opis σ-ciała ogonowego do analizy zbieżności według prawdopodobieństwa dla łańcuchów *PZP* generowanych przez algorytm *SA*.

(3) Osiągalność globalnego minimum z prawdopodobieństwem 1, czyli asymptotyczna poprawność algorytmu jest, naszym zdaniem, ważniejsza dla zastosowań w optymalizacji kombinatorycznej niż zbieżność algorytmu według prawdopodobieństwa, której poświęcono w literaturze znacznie więcej miejsca: [Ca], [ChiCho 1–4], [Ge], [GeGe], [Ha], [HwSh 1–2], [Ts 1–2] i in. Kończąc procedurę poszukiwania minimum w kroku t wybieramy bowiem $x \in \arg\min_{k\le t} u(X_k)$, a nie X_t. Łatwo zauważyć, że metoda Monte Carlo w swojej najprostszej postaci, uważana powszechnie za "ostatnią deskę ratunku" przy rozwiązywaniu trudnych problemów kombinatorycznych, gwarantuje osiągalność globalnego minimum z prawdopodobieństwem 1. Podane w tym rozdziale fakty świadczą o tym, że algorytm *SA* również posiada tę własność. Istotnie, w problemach kombinatorycznych warunek słabej odwracalności jest spełniony oraz możemy oszacować z góry wartość $r(\mathbf{u}) := \max_{i\in S} u_i - \min_{i\in S} u_i$, co w rezultacie pozwala dobrać właściwy ciąg $(\varepsilon_t)_{t\ge 0}$ — np. $1/(t^{1/r(\mathbf{u})})$, aby zapewnić sobie, korzystając z wniosku 6.2, osiągalność globalnego minimum z prawdopodobieństwem 1. Oczywiście systematyczne przeszukiwanie przestrzeni stanów także jest "asymptotycznie poprawne". Dotychczasowa analiza nie wyjaśnia zatem dlaczego algorytm *SA* jest najbardziej efektywnym spośród znanych algorytmów, w zadaniach projektowania układów scalonych o wysokim stopniu integracji (*VLSI*). Właściwe porównanie stochastycznych algorytmów optymalizacyjnych byłoby możliwe dopiero wówczas, gdy potrafilibyśmy wystarczająco dokładnie oszacować, jak szybko

te algorytmy osiągają z ustalonym prawdopodobieństwem globalne minimum oraz w jaki sposób taka szybkość zależy od istotnych dla nas parametrów. Mówiąc dokładniej: chcielibyśmy wiedzieć, czy i jak

$$\mathbf{Pr}\{\min_{k\leq t} u(X_k) - \min_{i\in S} u_i > \varepsilon\}$$

zależy od:

(a) parametrów problemu — np. s, $\mathbf{u}$;

(b) parametrów metody rozwiązania — np. $\mathbf{\Delta} = (\delta_{ij})_{i\neq j}$, $(\varepsilon_t)_{t\geq 0}$, rozkładu X_0;

(c) t;

(d) ε.

Wydaje się, że wyniki tego rodzaju są trudne do udowodnienia i brak ich w literaturze.

Bibliografia

[AbBiFi] M. Abbad, T. Bielecki and J. Filar. Algorithms for singularly perturbed limiting average control problems. *IEEE Transactions on Automatic Control*, AC 37:1421–1425, 1992.

[Al 1] D. Aldous. Some inequalities for reversible Markov chains. *Journal of the London Mathematical Society*, 25(2):564–576, 1982.

[Al 2] D. Aldous. On the Markov chain simulation method for uniform combinatorial distributions and simulated annealing. *Probability in the Engineering and Informational Sciences*, 1:33–46, 1987.

[Al 3] D. Aldous. Reversible Markov chain and random walks on graphs. 1994. Preprint.

[AnTs] V. Anantharam and P. Tsoucas. A proof of the Markov chain tree theorem. *Statistics & Probability Letters*, 8: 189–192, 1989.

[ApKa] D. Applegate and R. Kannan. Sampling and integration of near log–concave functions. *Proceedings of the 23rd ACM Symposium on Theory of Computing*, ACM Press, 156–163, 1991.

[BiFi] T. Bielecki and J. Filar. Singularly perturbed Markov control problem: limiting average cost. *Annals of OR*, 28: 153–168, 1991.

[BiSt] T. Bielecki and Ł. Stettner. Ergodic control of singularly perturbed Markov process in discrete time with general state and compact action spaces. 1996. Preprint.

[Bo] V. S. Borkar. Pathwise recurrence orders and simulated annealing. *J. Appl. Prob.*, 29:472–476, 1992.

[BoMa] R. Bott and J.P. Mayberry. Matrices and trees, in *Economic Activity Analysis*. Edited by O. Morgenstern, John Wiley & Sons, Inc., New York; Chapman & Hall, Ltd., London, 1954.

[BrRy] R. A. Brualdi and H. J. Ryser. *Combinatorial Matrix Theory*. Cambrigde University Press, 1991.

[Ca] O. Catoni. Rough large deviation estimates for simulated annealing: application to exponential schedules. *Ann. Probab.*, 20:1109–1146, 1992.

[Cha] S. Chaiken. A combinatorial proof of the all minors matrix tree theorem. *SIAM J. Alg. Disc. Meth.*, 3:319–329, 1982.

[Che] W.-K. Chen. *Applied Graph Theory, Graphs and Electrical Networks*. North–Holland, New York, 2nd edition, 1976.

[ChiCho 1] T.-S. Chiang and Y. Chow. On eigenvalues and annealing rates. *Math. Operat. Res.*, 13:508–511, 1988.

[ChiCho 2] T. S. Chiang and Y. Chow. On the asymptotic behavior of some inhomogeneous Markov processes. *Ann. Prob.*, 17:1483–1502, 1989.

[ChiCho 3] T.-S. Chiang and Y. Chow. A comparison of Simulated Annealing of Gibbs sampler and Metropolis algorithms. *Lecture Notes in Statistic*, 74:117–124, 1991.

[ChiCho 4] T.-S. Chiang and Y. Chow. Asymptotic bahavior of eigenvalues and random updating schemes. *Appl. Math. Optim.*, 28:259–275, 1993.

[Co 1] H. Cohn. On a paper by Doeblin on non–homogeneous Markov chain. *Adv. Appl. Prob.*, 13:388–401, 1981.

[Co 2] H. Cohn. On a class of non–homogeneous Markov chains. *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, 92:527–534, 1982.

[Con] D. P. Connors. *Balance of Recurrence Order in Time–Inhomogenous Markov Chains with Application to Simulated Annealing.* PhD thesis, University of Illinois, Urbana, IL, 1988.

[ConKu 1] D. P. Connors and P. R. Kumar. Balance of recurrence order in time–inhomogenous Markov chains with application to simulated annealing. *Probab. Engrg. Inform. Sci.*, 2:157–184, 1988.

[ConKu 2] D. P. Connors and P. R. Kumar. Simulated annealing type Markov chains and their balance equations. *SIAM J. Control & Optim.*, 27(6):1440–1461, 1989.

[CvDoSa] D.M. Cvetković, M. Doob and H. Sachs. *Spectra of Graphs — Theory and Applications.* VEB Deutscher Verlag d. Wiss., Berlin, 1979; Acad. Press, New York, 1979.

[DeKuKu] M. Desai, S. Kumar and P. R. Kumar. Quasi–statically cooled Markov chains. *Probab. Engrg. Inform. Sci.*, 8:1–19, 1994.

[DiSt] P. Diaconis and D. Stroock. Geometric bounds for eigenvalues of Markov chains. *Ann. Appl. Probab.*, 1:36–61, 1991.

[DiHa] P. Diaconis and P. Hanlon. Eigen analysis for some examples of the Metropolis Algorithm. *Contemporary Mathemetics*, 138:99–117, 1992.

[DiS–C] P. Diaconis and L. Saloff–Coste. Comparison theorems for reversible Markov chains. *Ann. Appl. Probab.*, 3:696–730, 1993.

[Din 1] I. H. Dinwoodie. A probability inequality for the occupation measure of a reversible Markov chain. *Ann. Appl. Probab.*, 5:37–43, 1995.

[Din 2] I. H. Dinwoodie. Expectations for nonreversible Markov chains. 1995. Preprint.

[DyFri] M. E. Dyer, A. Frieze. On the complexity of computing the volume of a polyhedron. *SIAM J. Comput.*, 17:967–974, 1988.

[DyFriKa] M. E. Dyer, A. M. Frieze and R. Kannan. A random polynomial time algorithm for approximating the volume of convexbodies. *J. Assoc. Comput. Mach.*, 38:1–17, 1991.

[FieSe] M. Fiedler and J. Sedlácek. O *w*–basich orientovaných grafu. *Cas. Pest. Mat.*, 83:214–225, 1958. (Chech.).

[Fi] J. Fill. Eigenvalue bounds on convergence to stationary for nonreversible Markov chains with an application to the exclusion processes. *Ann. Appl. Probab.*, 1:62–87, 1991.

[FoLa] B.L. Fox and D.M. Landi. An algorithm for identifying the ergodic subchains and transient states of a stochastic matrix. *Comm. ACM*, 2:619–621, 1968.

[FreWe 1] M. I. Freidlin and A. D. Wentzell. On small random perturbations of dynamical systems. *Russian Math. Surveys*, 25(1):1–55, 1970.

[FreWe 2] M. I. Freidlin and A. D. Wentzell. *Random Perturbations of Dynamical Systems.* Springer, New York, 1984.

[FriKaPo] A. Frieze, R. Kannan and N. Polson. Sampling from log–concave distributions. *Ann. Appl. Probab.*, 3:812–837, 1994.

[Ge] D. Geman. Random fields and inverse problems in imaging. *Lecture Notes in Mathematics*, 1427, 1990.

[GeGe] D. Geman and S. Geman. Stochastic relaxation, Gibbs distributions, and the Bayesian restoration of images. *IEEE Trans. Pattern Anal. Machine Intelligence*, 6:721–741, 1984.

[Gi] B. Gidas. Metropolis–type Monte Carlo simulation algorithms and Simulated Annealing. In *Topics in Contemporary Probability and Its Applications.* J. L. Snell ed, CRC Press, New York, 1995.

[Gil] D. Gillman. A Chernoff bound for random walks on expander graphs. In *Proceedings of the 34th Symposium on Foundations of Computer Science*, IEEE Computer Society Press, Los Alamitos, Califormia, 1993.

[Gr] W.K. Grassmann. Means and variances in Markov reward systems, in *Linear Algebra, Markov Chains and Queuing Models.* C.D. Meyer and R.J. Plemmons, eds., Springer–Verlag, New York, 193–204, 1993.

[GrTaHe] W.K. Grassmann, M.I. Taksar and D.P. Heyman. Regenerative analysis and steady–state distributions for Markov chains. *Oper. Res.*, 33:1107–1116, 1985.

[Gro] R. Grone. On the geometry and Laplacian of a graph. *Linear Algebra and Its Applications*, 150:167–178, 1991.

[Ha] B. Hajek. Cooling schedules for optimal annealing. *Math. Operat. Res.*, 13(2):311–329, 1988.

[HasHav] R. Hassin and M. Haviv. Mean passage times and nearly uncoupled Markov chains. *SIAM J. Disc. Math.*, 5:386–397, 1992.

[HavRi] M. Haviv and Y. Ritov. On series expansions and stochastic matrices. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 14(3):670–676, 1993.

[Hig] N. J. Higham. *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms.* SIAM, Philadelphia, PA, 1995.

[Hi] T. L. Hill. Studies in irreversible thermodynamics IV. Diagrammatic representation of steady state fluxes for unimolecular systems. *J. Theoret. Biol.*, 10:442–459, 1966.

[He] D.P. Heyman. Accurate computation of the fundamental matrix of a Markov chain. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 16(3):954–963, 1995.

[HeRe] D.P. Heyman and A. Reeves. Numerical solution of linear equations arising in Markov chain model. *ORSA J. Comput.*, 1:52–60, 1989.

[HoJo 1] R.A. Horn and Ch.R. Johnson. *Matrix Analysis.* Cambridge Univ. Press, 1985.

[HoJo 2] R.A. Horn and Ch.R. Johnson. *Topics in Matrix Analysis*. Cambridge Univ. Press, 1991.

[HwSh 1] C.-R. Hwang and S.-J. Sheu. Large–time behavior of perturbed diffusion Markov processes with applications to the second eigenvalue problem for Fokker–Planck operators and simulated annealing. *Acta Appl. Math.*, 19:253–295, 1990.

[HwSh 2] C.-R. Hwang and S.-J. Sheu. Singular perturbed Markov chains and exact behaviors of simulated annealing processes. *J. Theor. Probab.*, 5:223–249, 1992.

[In] S. Ingrassia. On the rate of convergence of the Metropolis algorithm and Gibbs sampler by geometric bounds. *Ann. Appl. Probab.*, 4(2):347–, 1994.

[Io] M. Iosifescu. *Finite Markov Processes and Their Applications*. Wiley and Sons, 1980.

[IsMa] D. L. Issacson and R. W. Madsen. *Markov Chains, Theory and Applications*. Wiley, New York, 1976.

[Je] M. Jerrum. The computational complexity of counting. *Proceedings of the International Congress of Mathematicians*. Zürich, Switzerland 1994, 1407–1416, 1995.

[JeSi] M. R. Jerrum and A. Sinclair. Polynomial–time approximation algorithms for the Ising model. *SIAM J. Comput.*, 22:1087–1116, 1993.

[JeSo] M. Jerrum and G. Sorkin. Simulated annealing for graph bisection. In *Proceedings of 34th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*, pages 1–21, 1993.

[Ka] N. Kahale. Large Deviation Bounds on Markov Chains. Technical Report 94–39, DIMACS, 1994.

[Kan] R. Kannan. Markov chains and polynomial time algorithms. *Proceedings of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, 656–671, 1994.

[Kat] T. Kato. *A Short Introduction to Perturbation Theory for Linear Operators*. Springer–Verlag, New York, 1982.

[KeSn 1] J.G. Kemeny and J.L. Snell. *Finite Markov Chains*. Van Nostrand, Princeton, 1960.

[KeSn 2] J.G. Kemeny and J.L. Snell. Finite continuous Markov chains. *Teor. Verojatnost. i Primenem.*, 6:110–115, 1961.

[KiGeVe] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt and M. P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220:671–680, 1983.

[KoVo] H. H. Kohler, E. Vollmerhaus. The frequency of cyclic processes in biological multistate systems. *J. Math. Biol.*, 9:275–290, 1980.

[Kor] C. A. Korneev. On mean recurrence time and mean sojourn time of an irreducible finite Markov chain in a given set of states. *Avtomat i Vyčisl. Tehn.*, 5:14–17, 1970 (Russian).

[LaAa] P. J. M. van Laarhoven and E. H. L. Aarts. *Simulated Annealing. Theory and Applications*. D. Riedel, 1987.

[LeRi 1] F. T. Leighton and R. L. Rivest. The Markov chain tree theorem. M.I.T. Laboratory for Computer Science, Technical Report, MIT/LCS/TM–249, 1983.

[LeRi 2] F. T. Leighton and R. L. Rivest. Estimating a probability using Finite Memory. *IEEE Trans. Information Theory*, 32(6):733–742, 1986.

[Me et al.] W. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller and E. Teller. Equations of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21:1087–1092, 1953.

[Mey] C. D. Meyer. The role of the group generalized inverse in the theory of finite Markov chains. *SIAM Rev.*, 17:443–464, 1975.

[Mo] B. Mohar. The Laplacian spectrum of graphs. In Y. Alavi et al., editor, *Graph Theory, Combinatories and Applications*, pages 871–898, J. Wiley, New York, 1991.

[Ni 1] W. Niemiro Tail events of a "Simulated Annealing" Markov chain. Preprint, 1993.

[Ni 2] W. Niemiro Limit distributions of Simulated Annealing Markov chains. *Discussiones Mathematicae*, 15:241–269, 1993.

[NiPo] W. Niemiro and P. Pokarowski. Tail events of some nonhomogeneous Markov chains. *Ann. Appl. Probab.*, 5(1):261–293, 1995.

[O'C 1] C. A. O'Cinneide. Entrywise perturbation theory and error analysis for Markov chains. *Numer. Math.*, 65:109–120, 1993.

[O'C 2] C. A. O'Cinneide. Relative–error bounds for the LU decomposition via the GTH algorithm. *Numer. Math.*, 73:507–519, 1996.

[Pe] V.V. Petrov *Limit Theorems of Probability Theory. Sequences of Independent Random Variables*. Oxford University Press, 1995.

[Po] P. Pokarowski. Klasy powracające niejednorodnych łańcuchów Markowa z zastosowaniem do analizy algorytmu Simulated Annealing. Praca magisterska, Instytut Matematyki Stosowanej i Mechaniki Uniwersytetu Warszawskiego, Warszawa, 1993.

[Pu] M. L. Puterman. *Markov Decision Processes. Discrete stochastic dinamic programming*. Wiley, New York, 1994.

[RoWi 1] J. R. Rohlicek and A. S. Willsky. The reduction of Markov generators: An algorithm exposing the role of transient states. *J. Assoc. Comput. Mach.*, 35:675–696, 1988.

[RoWi 2] J. R. Rohlicek and A. S. Willsky. Multiple time scale decomposition of discrete time Markov chains. *Systems & Control Letters*, 11:309–314, 1988.

[RomSa] F. Romeo and A. Sangiovanni–Vincentelli. A theoretical framework for simulated annealing. *Algorithmica*, 6:367–418, 1991.

[Sch 1] P. J. Schweitzer. Perturbation theory and finite Markov chains. *J. Appl. Probab.*, 5:401–413, 1968.

[Sch 2] P. J. Schweitzer. Perturbation series expansions of nearly completely decomposable Markov chains. Working Papers Series No. 8122, The Graduate School of Management, University of Rochester, Rochester, NY, 1981.

[Sch 3] P. J. Schweitzer. Perturbation series expansions of nearly completely decomposable Markov chains. In J. W. Cohen O. J. Boxma and H. C. Tijm, editors, *Telegrafic Analysis and Computer Perfomance Evaluation*, Elsevier, North–Holland, Amsterdam, 1986.

[Se] E. Seneta. *Nonnegative Matrices and Markov Chains*. Springer, New York, second edition, 1981.

[Shi] A.N. Shiryayev. *Probability*. Nauka, Moscow, 1989 (in Russian).

[Sh] B. O. Shubert. A flow-graph formula for the stationary distribution of a Markov chain. *IEEE Trans. Systems Man. Cybernet.*, 5:565–566, 1975.

[Si] A. Sinclair. Improved bounds for mixing rates of Markov chains and multicommodity flow. *Combinatorics, Probability and Computing*, 1:351–370, 1992.

[SiJe] A. J. Sinclair and M. R. Jerrum. Approximate counting, uniform generation and rapidly mixing Markov chains. *Inform. Comput.*, 82:93–133, 1989.

[So] A. D. Sokal. *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foudations and New Algorithms.* Cours de Troisiéme Cycle de la Physique en Suisse Romande, Lausanne, June 1989 (unpublished).

[Sor] G. B. Sorkin. Theory and Practice of Simulated Annealing on Special Energy Landscapes. PhD thesis, University of California at Berkeley, July 1991.

[Ste] G. W. Stewart. *Introduction to Matrix Computations*. Academic Press, New York, 1973.

[Ta] Y. Takahashi. On the effects of small deviations in the transition matrix of a finite Markov chain. *J. Operat. Res. Soc. Japan*, 16:104–129, 1973.

[Ti] L. Tierney. Markov chains for exploring posterior distribution. *Ann. Statist.*, 22(4):1701–1762, 1994.

[Ts 1] J. N. Tsitsiklis. A survey of large time asymptotics of simulated annealing algorithms. In W. Fleming and P. L. Lions, editors, *Stochastic Differential Systems. Stochastic Control Theory and Applications*, pages 583–599, Springer–Verlag, New York, 1988.

[Ts 2] J. N. Tsitsiklis. Markov chains with rare transitions and simulated annealing. *Math. Operat. Res.*, 14(1):70–90, 1989.

[Tw] R. L. Tweedie. Perturbations of countable Markov chains and processes. *Ann. Inst. Statistical Math.*, 32:283–290, 1980.

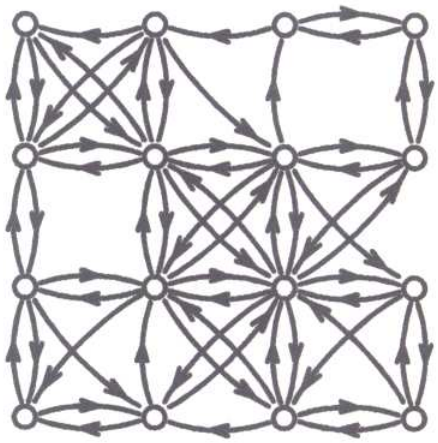
[Wel] D. J. A. Welsh. *Complexity: Knots, Colourings and Counting*. Volume 186, London Mathematical Society Lecture Note Series, Cambridge University Press, 1993.

[We] A. D. Wentzell. On the asymptotics of eigenvalues of matrices with elements of order $\exp(V_{ij}/2\varepsilon^2)$. *Dokl. Akad. SSSR*, 202:263–265, 1972. (In Russian; translation *Soviet. Math. Dokl.*, 13: 65–68).

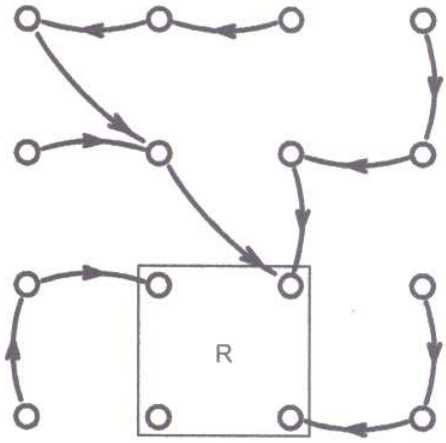
[Xu] J. Xue. A note on entrywise perturbation theory for Markov chains. *Linear Algebra and Its Applications*, 260:209–213, 1997.

[Zie] R. Zieliński. Records of simulated annealing, Stochastic optimization and design. Preprint, 1992.

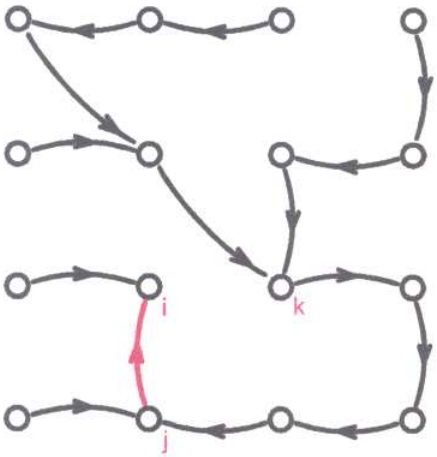
Dodatek 1



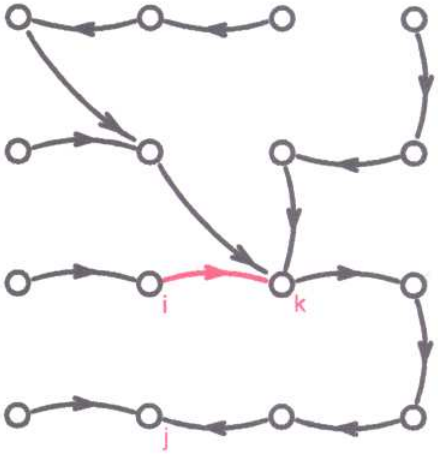
Rys. 1.1.1.



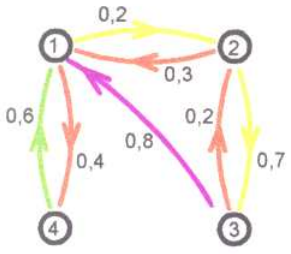
Rys. 1.1.2.



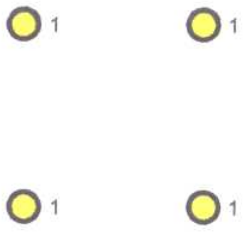
Rys. 2.1.1.



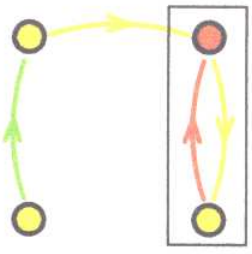
Rys. 2.2.2.



Rys. 4.1.1.

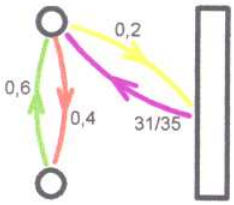


Rys. 4.1.2.

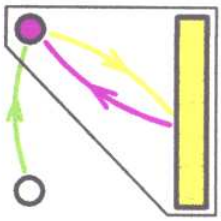


Rys. 4.1.3.

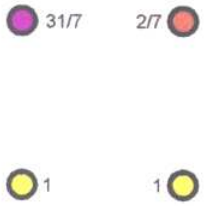
Rys. 4.1.4.



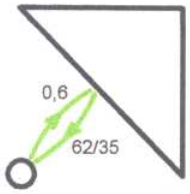
Rys. 4.1.5.



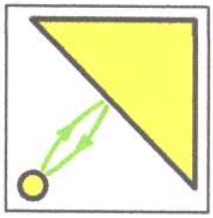
Rys. 4.1.6.



Rys. 4.1.7.

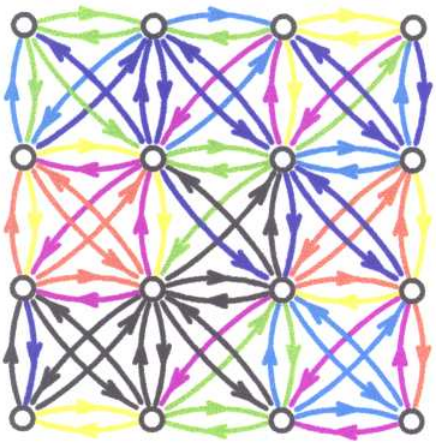


Rys. 4.1.8.

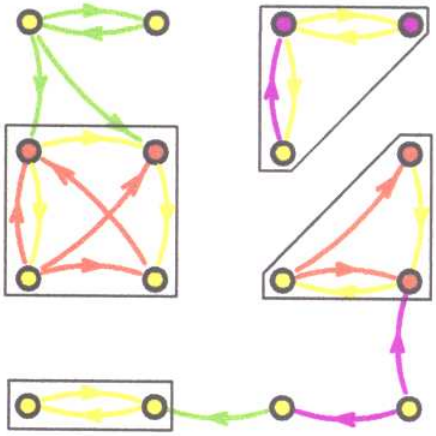


Rys. 4.1.9.

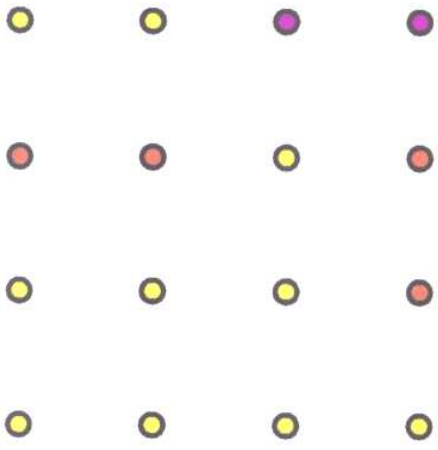
Rys. 4.1.10.



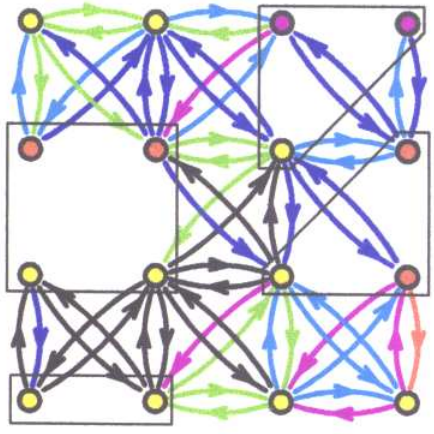
Rys. 4.2.1.



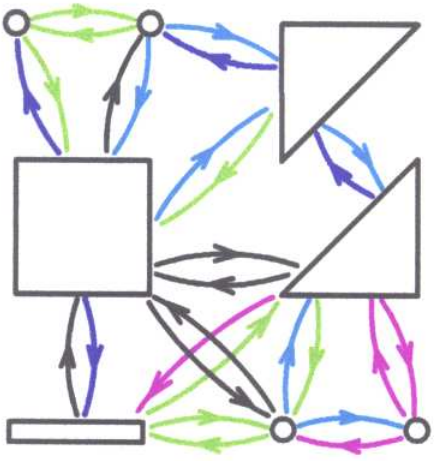
Rys. 4.2.2.



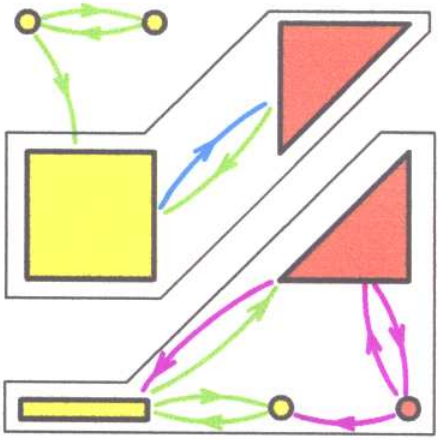
Rys. 4.2.3.



Rys. 4.2.4.

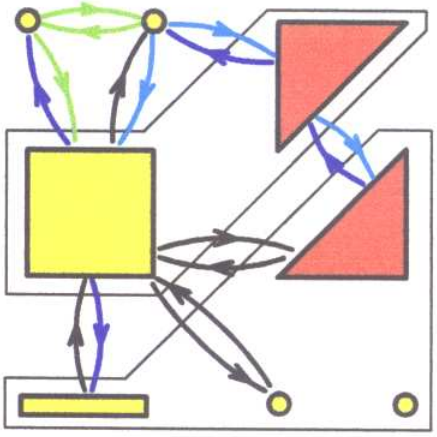


Rys. 4.2.5.

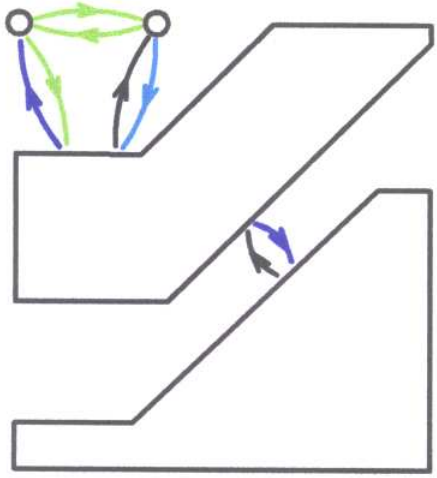


Rys. 4.2.6.

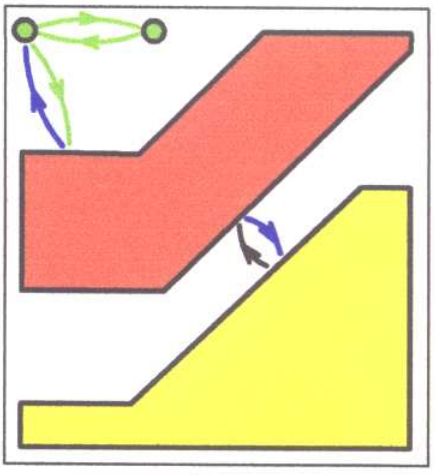
Rys. 4.2.7.



Rys. 4.2.8.

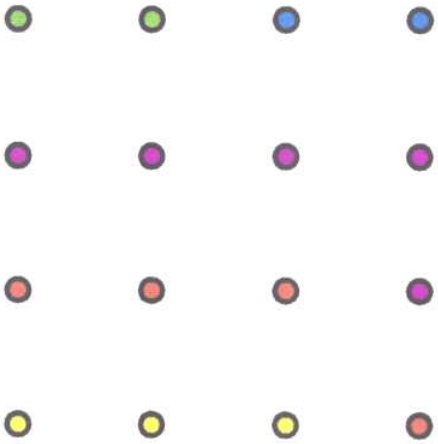


Rys. 4.2.9.

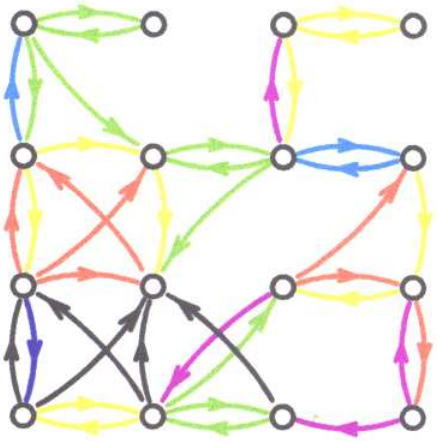


Rys. 4.2.10.

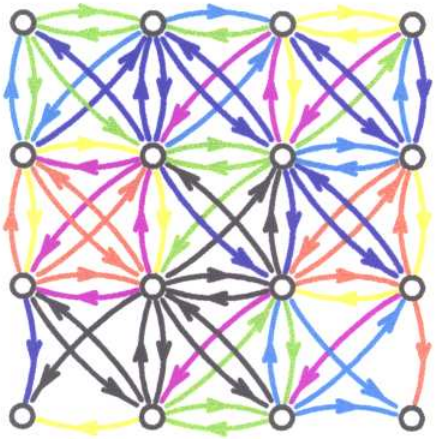
4



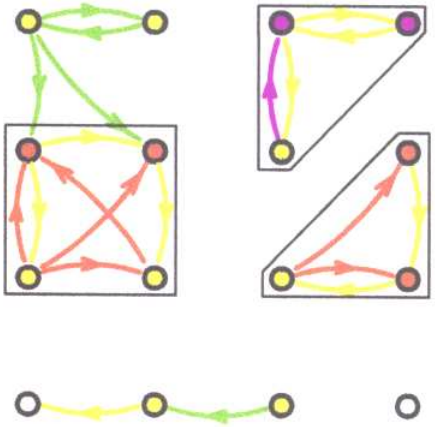
Rys. 4.2.11.



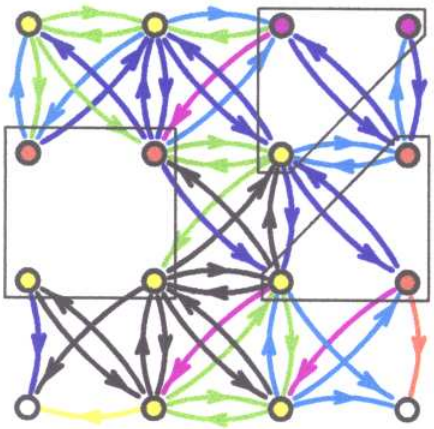
Rys. 4.2.12.



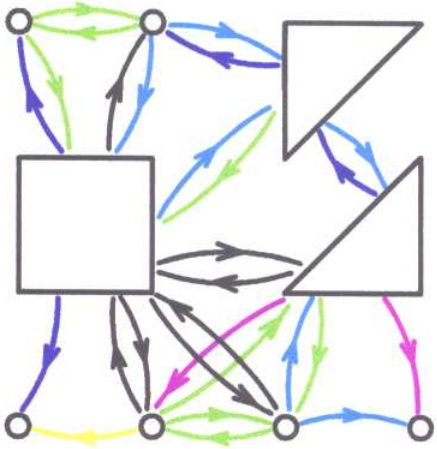
Rys. 4.3.1.



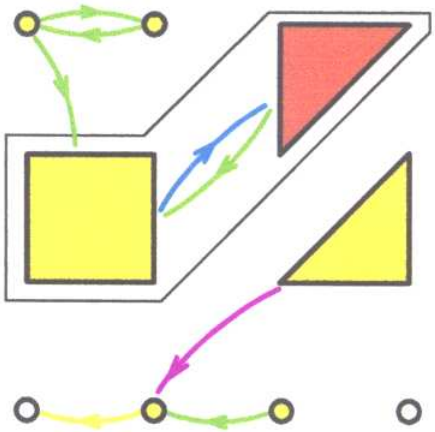
Rys. 4.3.2.



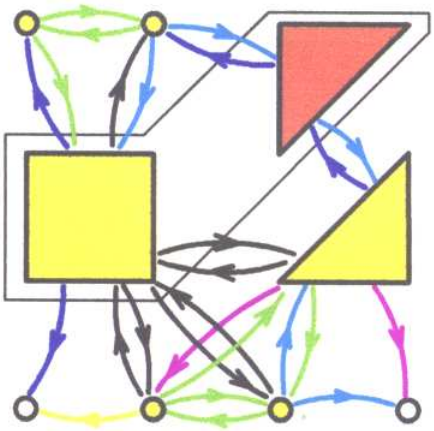
Rys. 4.3.3.



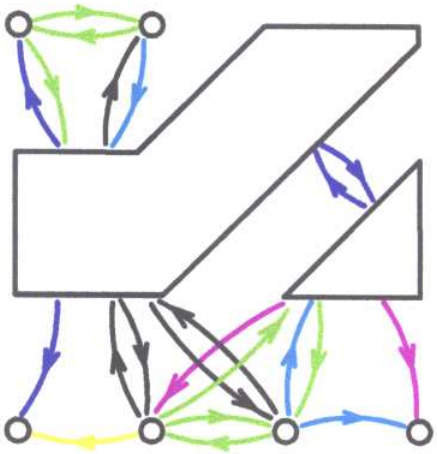
Rys. 4.3.4.



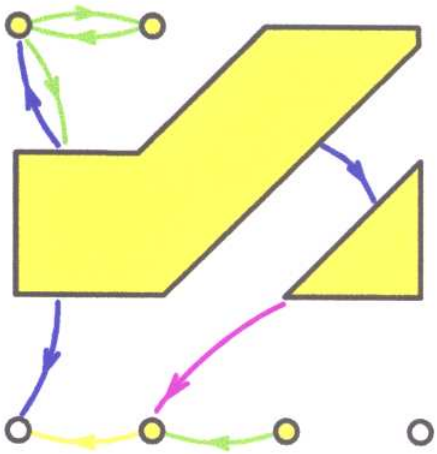
Rys. 4.3.5.



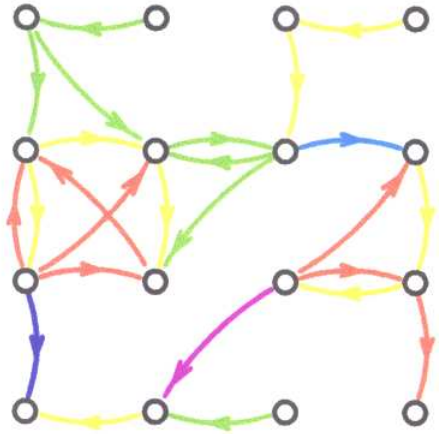
Rys. 4.3.6.



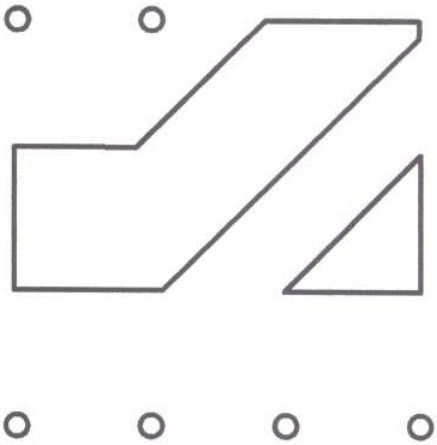
Rys. 4.3.7.



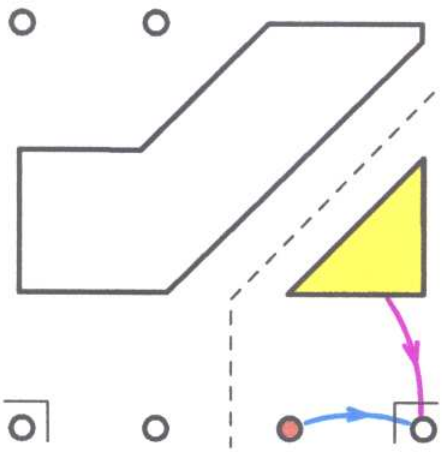
Rys. 4.3.8.



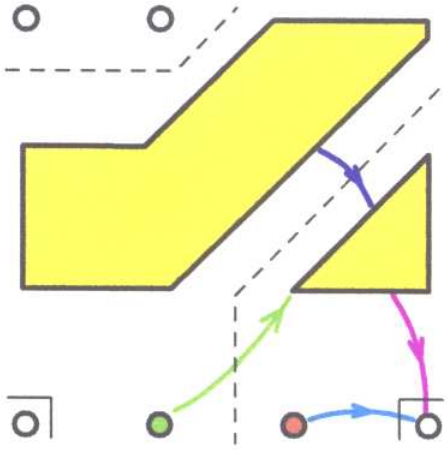
Rys. 4.3.9.



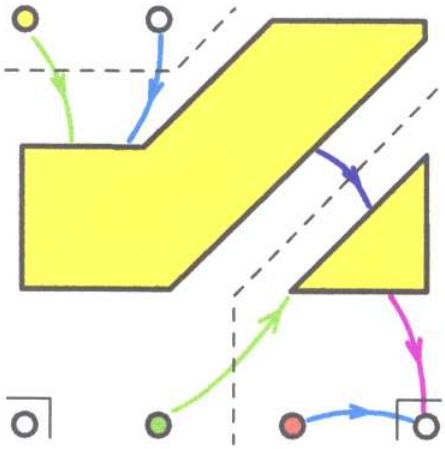
Rys. 4.4.1.



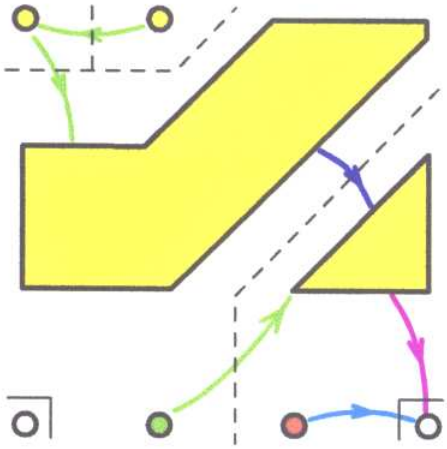
Rys. 4.4.2.



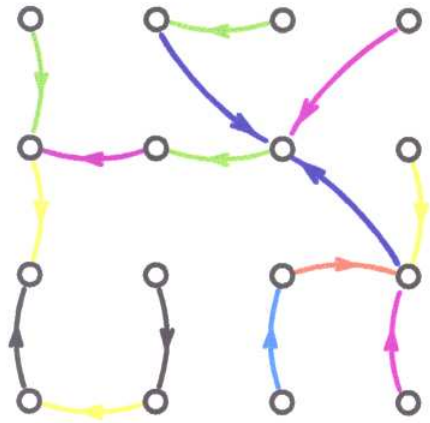
Rys. 4.4.3..



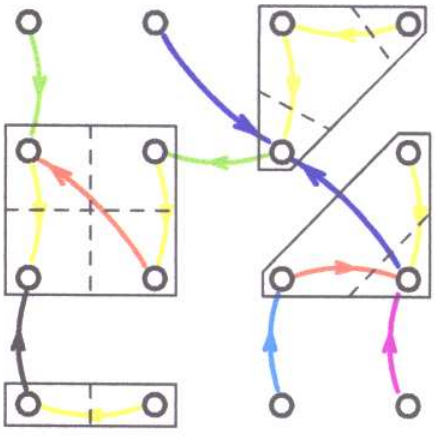
Rys. 4.4.4.



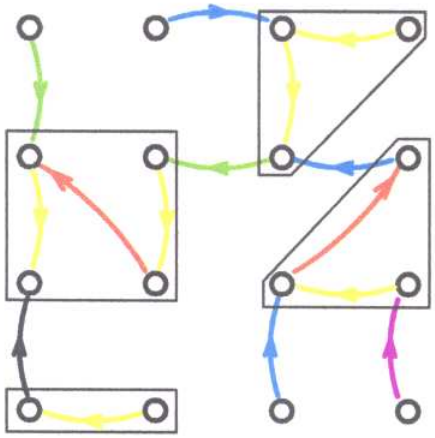
Rys. 4.4.5.



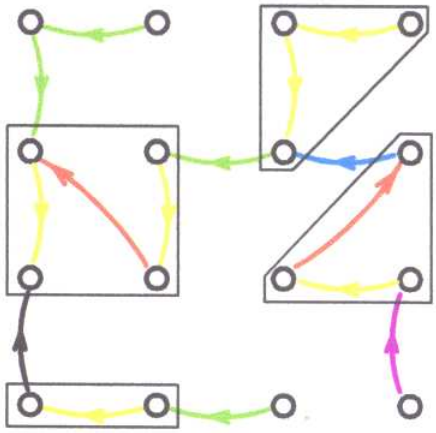
Rys. 4.5.1.



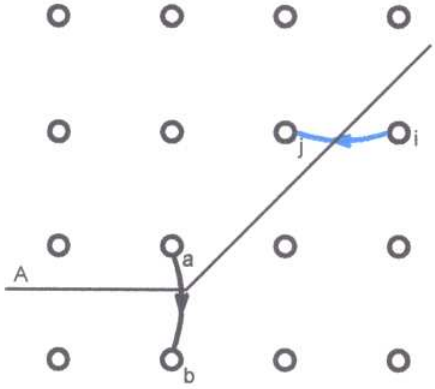
Rys. 4.5.2.



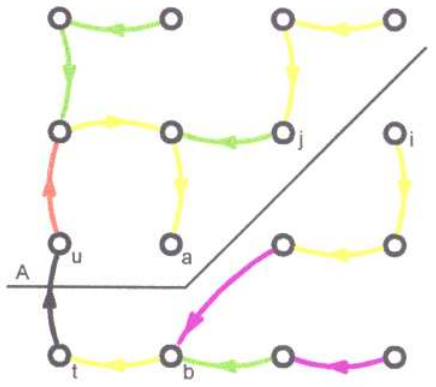
Rys. 4.5.3.



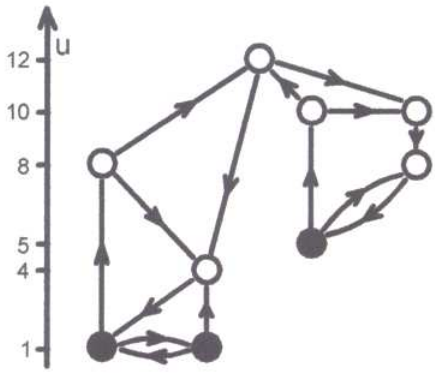
Rys. 4.5.4.



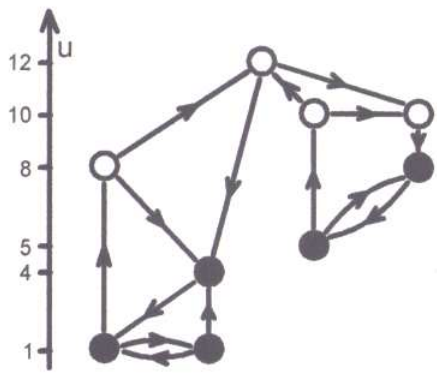
Rys. 6.1.1.



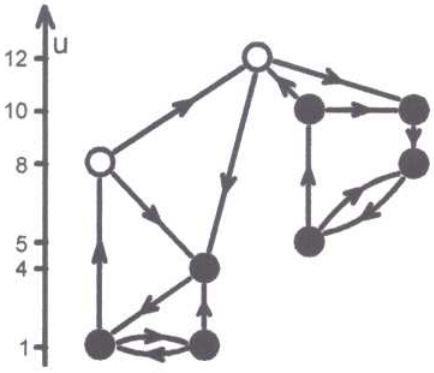
Rys. 6.1.2.



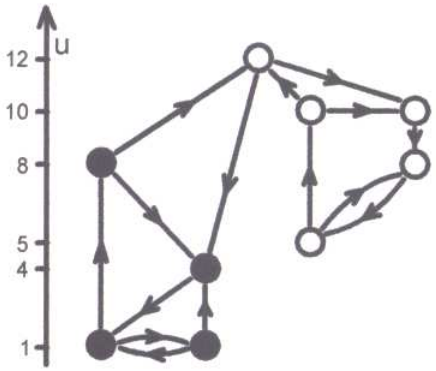
Rys. 6.2.1. $0 \leq \rho < 3$.



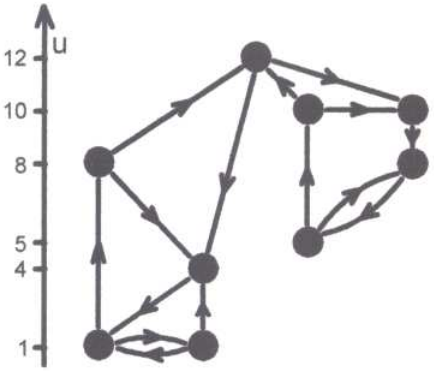
Rys. 6.2.2. $3 \leq \rho < 5$.



Rys. 6.2.3. $5 \leq \rho < 7$.



Rys. 6.2.4. $7 \leq \rho < 11$



Rys. 6.2.5. $11 \leq \rho$.